

УДК 530.1(075.8)
ББК 22.3
Л39

Леденев А. Н. **Физика**. В 5 кн. Кн. 5. **Основы квантовой физики**. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. — 248 с. — ISBN 5-9221-0465-9.

Основу настоящего курса физики, издаваемого в пяти книгах, составляют лекции, читаемые автором слушателям Института криптографии, связи и информатики Академии ФСБ России. Данная книга посвящена атомной физике и физике твердого тела, затрагиваются некоторые другие вопросы. Рассмотрены следующие темы: элементы специальной теории относительности; теория строения атома; основы квантовой статистики; равновесное тепловое излучение; тепловые и электрические свойства кристаллов, проводники и полупроводники; лазеры. Изложение ведется на основе квантовых представлений. В соответствии с программой дисциплины «Физика» дается краткое, но достаточно строгое изложение учебного материала в виде системы физических понятий, определений, законов и теорем.

Для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности «Информатика и вычислительная техника».

Рецензенты:

кафедра физики Московского института радиозлектроники и автоматики;
проф. А.Н. Сафронов (Научно-исследовательский институт ядерной физики
МГУ им. М.В. Ломоносова)

ISBN 5-9221-0465-9

© ФИЗМАТЛИТ, 2005

© А. Н. Леденев, 2005

ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА

Издательство «Лань»  ЛАНЬ

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	8
Глава I. Элементы специальной теории относительности	9
§ 1. Преобразования Лорентца	9
§ 2. Релятивистская динамика	17
Задачи	21
Глава II. Корпускулярно-волновой дуализм.	22
§ 3. Фотоэффект	22
§ 4. Эффект Комптона	28
§ 5. Волновые свойства частиц.	31
§ 6. Принцип неопределенности	35
Задачи	41
Глава III. Математические основы квантовой механики.	43
§ 7. Операторы физических величин и средние значения	43
§ 8. Собственные состояния. Уравнение Шредингера	49
Задачи	55
Глава IV. Квантование энергии	56
§ 9. Частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками	56
§ 10. Частица в потенциальной яме со стенками конечной высоты.	59
§ 11. Туннельный эффект	63
§ 12. Гармонический осциллятор	65
Задачи	67
Глава V. Атомная физика	69
§ 13. Постулаты Бора	69
§ 14. Классификация состояний электронов. Квантовые числа	71
§ 15. Спектр водорода	76
§ 16. Распределение электронной плотности в водородоподобном атоме	79

§ 17. Угловой момент	83
§ 18. Магнитные свойства водородоподобных атомов	91
§ 19. Строение многоэлектронных атомов	97
Задачи	106
Глава VI. Основы квантовой статистики.	108
§ 20. Распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака	108
§ 21. Статистический вес	114
Задачи	121
Глава VII. Тепловое излучение	122
§ 22. Характеристики равновесного теплового излучения	122
§ 23. Формула Планка. Закон смещения Вина	130
§ 24. Закон Стефана–Больцмана	133
Задачи	136
Глава VIII. Тепловые свойства кристаллов	137
§ 25. Звуковые волны в кристаллах	137
§ 26. Фононы	146
§ 27. Теплоемкость кристаллических решеток	150
Задачи	157
Глава IX. Электроны в кристаллах	159
§ 28. Энергетические зоны в кристаллах. Проводники и изоляторы	159
§ 29. Волны Блоха.	163
§ 30. Электропроводность кристаллов	173
§ 31. Теплоемкость вырожденного электронного газа.	177
Задачи	184
Глава X. Полупроводники	185
§ 32. Чистые и примесные полупроводники. Концентрация электронов и дырок	185
§ 33. Электропроводность полупроводников	193
§ 34. n – p -переход	196
§ 35. Транзисторы	201
Задачи	202
Глава XI. Лазеры	204
§ 36. Вынужденное излучение	204
§ 37. Поглощение и излучение света веществом	211

§ 38. Принцип работы лазера	213
§ 39. Устройство лазеров	215
Задачи	218
Ответы к задачам	219

П р и л о ж е н и я

I. Основные определения и формулы	223
Кинематика и динамика специальной теории относительности	223
Корпускулярно-волновой дуализм	224
Математические основы квантовой механики	225
Атомная физика	227
Основы квантовой статистики	229
Тепловое излучение	230
Тепловые свойства кристаллов	233
Электроны в кристаллах	235
Полупроводники	236
Лазеры	238
II. Фундаментальные физические константы	240
III. Плотности некоторых веществ	241
IV. Периодическая таблица элементов Д. И. Менделеева	242
Предметный указатель	244

ПРЕДИСЛОВИЕ

Основу настоящего курса физики составляют лекции, читаемые автором слушателям Института криптографии, связи и информатики Академии ФСБ России. Данная книга, посвященная в целом атомной физике и физике твердого тела, включает следующие темы: элементы специальной теории относительности; теория строения атома (на примере атома водорода решается задача о квантовании энергии, рассматриваются свойства углового момента, магнитные характеристики атома, строение многоэлектронных атомов); основы квантовой статистики; равновесное тепловое излучение; теория теплоемкости кристаллов; электрические свойства проводников и полупроводников; лазеры. Элементы специальной теории относительности даны лишь в объеме, необходимом для объяснения экспериментальных фактов, лежащих в основе квантовых представлений (связь энергии и импульса фотона, эффект Комтона, и др.). При необходимости быстрого перехода к изучению непосредственно квантовой физики чтение книги можно начинать со второй главы.

Понимание практически всех перечисленных тем возможно только с использованием квантовых представлений. Поэтому в книге в сжатой форме излагаются математические основы, понятия и принципы квантовой механики. Количественно решаются только простейшие задачи, многие вопросы излагаются качественно на основе результатов, полученных теоретической физикой.

Как и в остальных частях курса, в этой книге в качестве основной применяется система единиц СИ. В приложении приводятся основные физические константы и формулы в системах СИ и гауссовой.

В приложение включены также основные определения физических понятий, формулировки законов и соответствующие формулы. В компактной форме приложение отражает основную суть всего учебного материала данной книги, и будет полезным как при первом ее чтении книги, так и в процессе повторения.

В соответствии с программой дисциплины «Физика» дается в целом краткое без излишней детализации, но достаточно строгое изложение учебного материала в виде системы физических понятий, определений, законов и теорем. Автор надеется, что такой подход позволит читателю сконцентрировать внимание на глубоком осмыслении основных явлений и важнейших теоретических представлениях современной физики.

Автор выражает глубокую признательность редактору Д. А. Миртовой, доброжелательные замечания которой и полезные советы способствовали существенному улучшению содержания всех пяти книг данного курса.

Автор

ЭЛЕМЕНТЫ СПЕЦИАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

В данной главе мы рассмотрим некоторые вопросы специальной теории относительности. Полученные результаты будут использованы в последующем изложении квантовой физики.

§ 1. Преобразования Лорентца

Постулаты классической физики. Специальная теория относительности была создана А. Эйнштейном (1879–1955) в 1905 г. и означала пересмотр представлений классической физики о свойствах пространства и времени. Термин «специальная» подчеркивает то обстоятельство, что теория рассматривает явления только в инерциальных системах отсчета.

Основные представления классической физики о свойствах пространства и времени можно свести к следующим положениям. Пространство является трехмерным и подчиняется евклидовой геометрии. Наряду с пространством существует время, которое можно рассматривать как четвертую независимую координату. Размеры тел и промежутки времени между двумя событиями одинаковы во всех системах отсчета. Существует так называемая инерциальная система отсчета, в которой выполняется закон инерции Галилея.

Справедливы преобразования Галилея, устанавливающие пространственно-временную связь любого события в разных инерциальных системах отсчета:

$$x' = x - Vt, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = t. \quad (1.1)$$

Здесь предполагается, что соответствующие координатные оси двух систем отсчета коллинеарны друг другу, и штрихованная система отсчета движется со скоростью V относительно нештрихованной вдоль координатной оси x .

Формулы преобразований Галилея служат математическим выражением утверждения классической механики о том, что промежутки времени между двумя событиями, как и расстояния между любыми двумя фиксированными точками пространства, одинаковы во всех си-

стемах отсчета. Одним из следствий преобразований Галилея является классический закон сложения скоростей (см. в кн. I «Механика», § 12):

$$\mathbf{V}_{\text{абс}} = \mathbf{V}_{\text{отн}} + \mathbf{V}_{\text{пер}}.$$

Согласно принципу относительности Галилея все инерциальные системы отсчета эквивалентны друг другу. При замене координат движущихся материальных точек и времени по формулам преобразований Галилея вид уравнений механики (в частности, уравнения $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$) не изменяется, уравнения механики инвариантны по отношению к преобразованиям Галилея. Этот факт является математическим выражением принципа относительности Галилея.

Соблюдается принцип дальнего действия: взаимодействия тел распространяются в пространстве мгновенно, то есть с бесконечно большой скоростью.

Опыт Майкельсона. Одним из опытов, результат которого не удается объяснить с помощью законов классической физики, является проведенный в 1881 г. опыт американского физика Майкельсона (1852–1931).

В физике конца XIX в. предполагалось, что по аналогии со звуковой волной, которая возникает в упругой среде и представляет собой процесс распространения в пространстве колебаний частиц этой среды, для существования света необходима особая неподвижная среда, так называемый эфир, в которой свет распространяется с постоянной скоростью c во всех направлениях. В любой движущейся относительно эфира системе отсчета скорость света должна отличаться от c , подчиняясь обычному закону сложения скоростей:

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}' + \mathbf{V}, \quad (1.2)$$

где \mathbf{c} — скорость света в эфире, \mathbf{c}' — скорость света, измеренная в движущейся системе отсчета, \mathbf{V} — скорость движущейся системы относительно неподвижного эфира.

Земля движется вокруг Солнца со скоростью приблизительно 30 км/с по замкнутой близкой к круговой орбите. Поскольку направление скорости меняется, Земля перемещается относительно неподвижного эфира по крайней мере на части своей траектории. Согласно закону сложения скоростей (1.2) скорость света, постоянная относительно эфира, в связанной с Землей системе отсчета должна зависеть от направления светового луча относительно Земли.

Пусть на расстоянии l от источника света S расположены два зеркала A и B , направления на которые образуют между собой угол 90° (рис. 1). Прямая, проходящая через источник S и зеркало A , параллельна скорости \mathbf{V} Земли относительно эфира. Время t_{\parallel} распространения света от источника S до зеркала A и обратно равно:

$$t_{\parallel} = \frac{l}{c - V} + \frac{l}{c + V} = \frac{2l}{c} \frac{1}{1 - V^2/c^2}, \quad (1.3)$$

где $(c - V)$ — скорость света относительно Земли при движении к зеркалу, $(c + V)$ — то же при движении света в обратном направлении.

Время t_{\perp} распространения света от источника S до зеркала B и обратно равно:

$$t_{\perp} = \frac{2l}{\sqrt{c^2 - V^2}} = \frac{2l}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}, \quad (1.4)$$

где $\sqrt{c^2 - V^2}$ — скорость света относительно Земли при движении от источника S к зеркалу B и обратно.

Метод регистрации времен t_{\parallel} и t_{\perp} основывался на анализе интерференции световых волн, отражаемых зеркалами A и B и сводимых в одной области пространства с помощью специальной оптической системы.

Из формул (1.3) и (1.4) видно, что время t_{\parallel} отличается от t_{\perp} . Однако опыт Майкельсона дал отрицательный результат: различие времен t_{\parallel} и t_{\perp} обнаружено не было. Следовательно величина скорости света не зависит от того, относительно какой системы отсчета она определяется. Был сделан вывод о том, что распространение света в пространстве не подчиняется вытекающему из преобразований Галилея закону сложения скоростей.

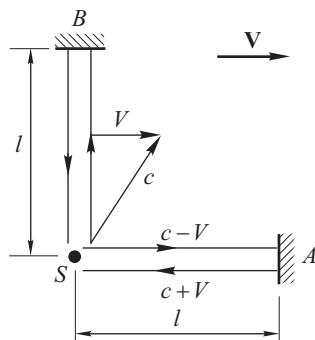


Рис. 1

Постулаты Эйнштейна и их следствия. В основу специальной теории относительности А. Эйнштейна положены два постулата.

1. Принцип относительности Эйнштейна: все уравнения, выражающие законы природы, инвариантны по отношению к переходу от одной инерциальной системы отсчета к другой. Принцип относительности Эйнштейна является обобщением принципа относительности Галилея на все без исключения, а не только механические, явления природы. В соответствии с принципом относительности никакими опытами нельзя установить, движется ли система отсчета с постоянной скоростью или она неподвижна.

2. Скорость света c в вакууме одинакова для всех инерциальных систем отсчета; она не зависит от движения источника света и одинакова во всех направлениях.

Следствие 1. Инвариантность поперечных размеров тел. Пусть инерциальная система отсчета K' движется со скоростью V относительно системы K ; оси координат $O'x'$ и Ox совпадают; оси $O'y'$ и Oy , а также $O'z'$ и Oz в любой момент времени остаются параллельными друг другу (рис. 2). $O'A'$ и OA — два одинаковых стержня, первый из которых неподвижен в системе K' и расположен вдоль оси $O'y'$, второй — неподвижен в системе K и расположен вдоль оси Oy .

Пусть в некоторый момент времени концы O' и O стержней совпадают («по условию задачи»). Тогда из принципа относительности

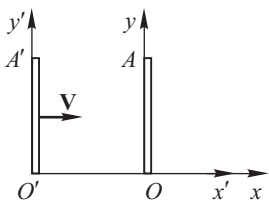


Рис. 2

следует, что в этот момент времени концы A и A' стержней также совпадают. Если бы это было не так, и движущийся вместе с системой K' стержень $O'A'$ оказался, например, короче стержня OA , то появляется экспериментальная возможность различить между собой две инерциальные системы отсчета. Это противоречит принципу относительности. Итак, можно утверждать, что поперечные размеры тел одинаковы во всех инерциальных системах отсчета.

Иначе говоря, закон преобразования поперечных координат тел при переходе от одной инерциальной системы отсчета к другой имеет вид:

$$y' = y,$$

$$z' = z.$$

Следствие 2. Замедление времени. Представим себе световые часы — стержень AB с двумя укрепленными на концах на расстоянии l друг от друга зеркальцами, между которыми перемещается световой импульс (рис. 3а). Периодическим процессом, который служит для измерения времени с помощью таких часов, является движение светового импульса от зеркала A к B и обратно.

Пусть часы неподвижны. Период неподвижных часов — время прохождения светового импульса от A к B и обратно — равен:

$$\tau_0 = \frac{2l}{c},$$

где l — расстояние между точками A и B , c — скорость света.

Пусть теперь стержень AB , расположенный параллельно координатной оси Oy , движется со скоростью V вдоль оси Ox неподвижной системы отсчета K (рис. 3б). На рисунке показаны положения стержня в моменты времени, когда световой импульс выходит из точки A (положение AB), достигает точки B (положение A_1B_1), возвращается в точку A (положение A_2B_2). Если τ — период движущихся часов, то путь AA_1 , пройденный стержнем за полпериода, равен $V\tau/2$, путь AB_1 , пройденный световым импульсом за полпериода, равен $c\tau/2$. Для прямоугольного треугольника AB_1A_1

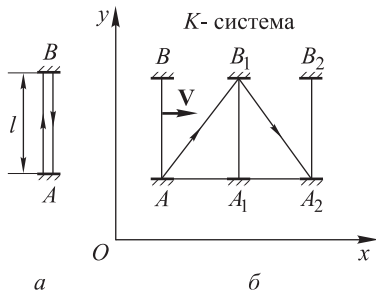


Рис. 3

выполняется соотношение:

$$AB_1^2 = AA_1^2 + A_1B_1^2, \\ \left(\frac{c\tau}{2}\right)^2 = \left(\frac{V\tau}{2}\right)^2 + l^2.$$

Отсюда найдем период τ движущихся часов:

$$\tau = \frac{2l}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} = \frac{\tau_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (1.5)$$

где введено обозначение $\beta = V/c$.

Таким образом, период τ движущихся часов увеличивается по сравнению с периодом τ_0 покоящихся часов в соответствии с формулой (1.5). Промежуток времени между любыми двумя событиями, измеренный по движущимся часам, будет меньше промежутка между этими событиями, измеренного с помощью неподвижных часов, в $\sqrt{1 - \beta^2}$ раз.

Следствие 3. Сокращение продольных размеров движущихся тел (лорентцево сокращение). Пусть стержень AB движется относительно K -системы со скоростью \mathbf{V} , направленной вдоль оси стержня и параллельной координатной оси Ox (рис. 4). В жестко связанной со стержнем K' -системе отсчета длина стержня (так называемая собственная длина) равна l_0 . Требуется по этим данным найти длину l стержня в K -системе отсчета, то есть длину движущегося стержня.

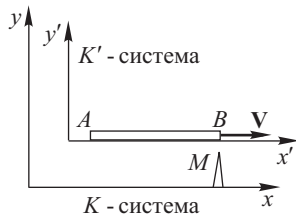


Рис. 4

Пусть M — неподвижная в K -системе точка, которую будем называть меткой. Искомая длина l равна произведению скорости V движения стержня на промежуток времени Δt_0 между двумя событиями последовательного совмещения метки M с концами B и A стержня (величина Δt_0 измеряется с помощью неподвижных в K -системе часов):

$$l = V\Delta t_0. \quad (1.6)$$

Если измерять промежуток времени Δt между теми же двумя событиями (последовательное совмещение метки M с концами B и A стержня) по неподвижным в K' -системе часам, то полученный результат будет равен:

$$\Delta t = \frac{\Delta t_0}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

Действительно, поскольку период покоящихся в K' -системе часов меньше периода часов, движущихся вместе с K -системой (см. следствие 2), измеренный по покоящимся часам промежуток Δt больше промежутка Δt_0 , измеренного с помощью движущихся часов.

Собственная длина l_0 , то есть длина покоящегося в K' -системе стержня, может быть представлена как произведение скорости V движения метки M на промежуток времени Δt между моментами ее последовательного совмещения с концами B и A стержня:

$$l_0 = V \Delta t = \frac{V \Delta t_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (1.7)$$

Поделив уравнения (1.6) и (1.7) друг на друга и преобразовав полученное равенство, найдем

$$l = l_0 \sqrt{1 - \beta^2}. \quad (1.8)$$

Последнее соотношение означает, что продольный размер (длина) движущегося стержня меньше его собственной длины. Это явление называют *лорентцевым сокращением*.

Преобразования Лорентца. Преобразования Лорентца (1853–1928) устанавливают связь пространственно-временных координат одного и того же события в разных инерциальных системах отсчета.

Пусть ось $O'x'$ обозначенной как K' системы отсчета совпадает с осью Ox K -системы отсчета, а две другие соответствующие координатные оси обеих систем остаются параллельными друг другу; система K' движется вдоль оси x со скоростью V относительно системы K (рис. 5). В момент, когда в процессе движения точки O и O' — начала координат систем отсчета K и K' — совмещаются, в обеих системах отсчета включаются часы. Иначе говоря, начало отсчета времени в обеих системах ($t = t' = 0$) соответствует совпадению в пространстве точек O и O' .

Необходимо установить связь координат и времени некоторого события A (например, вспышки лампочки) в двух системах отсчета.

Пусть точка P — основание перпендикуляра, опущенного на оси $O'x'$ и Ox в момент времени, когда произошло событие A .

В K -системе отсчета: x, y, z — пространственные координаты, t — момент времени события A ; точка P в момент t имеет координаты $(x, 0, 0)$; точка O' в этот же момент времени имеет координаты $(Vt, 0, 0)$.

В K -системе отсчета длина отрезка $O'P$ равна:

$$(O'P)_K = x - Vt; \quad (1.9)$$

длина отрезка OP равна:

$$(OP)_K = x. \quad (1.10)$$

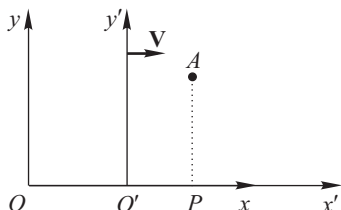


Рис. 5

В K' -системе отсчета: x' , y' , z' — пространственные координаты, t' — момент времени события A ; точка P в момент времени t' имеет координаты $(x', 0, 0)$; точка O в этот же момент времени имеет координаты $(-Vt', 0, 0)$.

В K' -системе отсчета длина отрезка $O'P$ равна:

$$(O'P)_{K'} = x'; \quad (1.11)$$

длина отрезка OP как разность координат точек P и O равна:

$$(OP)_{K'} = x' - (-Vt') = x' + Vt'. \quad (1.12)$$

Воспользуемся формулой лорентцева сокращения, чтобы связать длины отрезков $O'P$ и OP в системах отсчета K и K' . Итак, отрезок $O'P$ движется со скоростью V относительно K -системы отсчета. В соответствии с (1.8) имеем

$$(O'P)_K = (O'P)_{K'} \sqrt{1 - \beta^2}$$

или с учетом (1.9) и (1.11):

$$x - Vt = x' \sqrt{1 - \beta^2}.$$

Отсюда получаем формулу перехода от координаты x и времени t к x' :

$$x' = \frac{x - Vt}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (1.13)$$

Отрезок OP движется со скоростью V относительно системы K' . Поэтому соответствии с (1.8) имеем

$$(OP)_{K'} = (OP)_K \sqrt{1 - \beta^2}$$

или с учетом (1.10) и (1.12):

$$x' + Vt' = x \sqrt{1 - \beta^2}.$$

Отсюда получаем формулу перехода от координаты x' и времени t' к x :

$$x = \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (1.14)$$

Вследствие неизменности поперечных размеров (см. следствие 2 постулатов Эйнштейна) две другие координаты, кроме x и x' , события A одинаковы в системах K и K' :

$$y' = y; \quad (1.15)$$

$$z' = z. \quad (1.16)$$

Исключая из (1.13) и (1.14) сначала x , а затем x' , найдем формулы перехода от t' и x' к t :

$$t = \frac{t' + x'V/c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (1.17)$$

а также от t и x к t' :

$$t' = \frac{t - xV/c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (1.18)$$

Итак, исходя из постулатов Эйнштейна, получены следующие формулы преобразования координат и времени некоторого события при переходе от одной инерциальной системы отсчета к другой (преобразования Лорентца):

$$\begin{aligned} x &= \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \\ y &= y', \\ z &= z', \\ t &= \frac{t' + x'V/c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}; \end{aligned} \quad (1.19)$$

формулы обратного перехода:

$$\begin{aligned} x' &= \frac{x - Vt}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \\ y' &= y, \\ z' &= z, \\ t' &= \frac{t - xV/c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}; \end{aligned} \quad (1.20)$$

где $\beta = V/c$, V — скорость относительного движения двух систем отсчета.

Если скорость относительного движения двух систем отсчета мала по сравнению со скоростью света, $V \ll c$ и $\beta \ll 1$, преобразования Лорентца переходят в преобразования Галилея (1.1). Если предположить, что $V > c$, полученные формулы преобразований Лорентца теряют смысл; это значит, что движение со скоростью, превышающей скорость света в вакууме c , невозможно.

Пример. Пусть в K' -системе отсчета два события A и B произошли одновременно в момент $t' = 0$ в разных точках пространства — одно в начале координат ($x' = y' = z' = 0$), другое — на оси $O'x'$ в точке с координатой x' . Тогда, согласно (1.17), в системе отсчета K первое событие произошло в момент времени $t_A = 0$, второе — в момент $t_B = \frac{x'V}{c^2\sqrt{1 - \beta^2}} \neq 0$. Таким образом, одновременные в одной системе отсчета события не обязательно являются одновременными в другой системе.

Приведем без вывода формулы преобразования скорости частицы при переходе из K - в K' -систему отсчета:

$$V'_x = \frac{V_x - V}{1 - V_x V/c^2}, \quad V'_y = \frac{V_y \sqrt{1 - (V/c)^2}}{1 - V_x V/c^2}, \quad V'_z = \frac{V_z \sqrt{1 - (V/c)^2}}{1 - V_x V/c^2}.$$

§ 2. Релятивистская динамика

Релятивистский импульс. В классической механике импульс частицы определяется как вектор, равный произведению массы m частицы на ее скорость \mathbf{V} :

$$\mathbf{p} = m\mathbf{V}.$$

При этом масса m является постоянной, не зависящей от скорости величиной.

Как свидетельствует опыт, импульс замкнутой механической системы частиц не изменяется с течением времени, то есть имеет место закон сохранения импульса. Логично потребовать выполнения закона сохранения импульса — одного из фундаментальных физических законов — и в специальной теории относительности.

Можно показать, что необходимым условием выполнения закона сохранения импульса системы релятивистских частиц является иное, по сравнению с классической механикой, определение импульса.

Импульс релятивистской частицы равен:

$$\mathbf{p} = m\mathbf{V} = \frac{m_0\mathbf{V}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.1)$$

где \mathbf{V} — скорость частицы, m_0 — масса покоящейся частицы (масса покоя), $\beta = V/c$.

Буквой m обозначена величина:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.2)$$

которую можно рассматривать как *массу частицы, движущейся со скоростью V* .

Основное уравнение релятивистской динамики. Основное уравнение классической динамики является математическим выражением второго закона Ньютона и имеет вид

$$m\mathbf{a} = \mathbf{F}, \quad (2.3)$$

где m — масса частицы, \mathbf{a} — ее ускорение, \mathbf{F} — действующая на частицу сила.

Если воспользоваться преобразованиями Лорентца (1.19) для записи уравнения (2.3) в другой системе отсчета, форма уравнения изменится. Следовательно, уравнение движения частицы (2.3) не удовлетворяет принципу относительности Эйнштейна.

Можно доказать, что инвариантным относительно преобразований Лорентца и, следовательно, удовлетворяющим принципу относительности Эйнштейна, является следующее уравнение:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}, \quad (2.4)$$

где \mathbf{p} — релятивистский импульс (см. (2.1) и (2.2)). Уравнение (2.4) называется *основным уравнением релятивистской динамики*.

Необходимо отметить, что в отличие от классической механики в релятивистской теории сила \mathbf{F} при переходе от одной инерциальной системы отсчета к другой не является инвариантной величиной, а преобразуется по определенным правилам.

Кинетическая энергия релятивистской частицы. Согласно теореме о кинетической энергии в классической механике работа действующей на частицу силы равна приращению кинетической энергии частицы. В релятивистской теории кинетическая энергия частицы определяется таким образом, чтобы выполнялась данная теорема.

Итак, *кинетическая энергия T релятивистской частицы* — это величина, приращение dT которой равно работе действующей на частицу силы:

$$dT = \mathbf{F} d\mathbf{r} = \mathbf{F} \mathbf{V} dt, \quad (2.5)$$

где \mathbf{F} — сила, $d\mathbf{r}$ — перемещение, \mathbf{V} — скорость частицы, t — время.

Из основного уравнения релятивистской динамики (2.4) следует:

$$\mathbf{F} dt = d\mathbf{p} = d(m\mathbf{V}) = dm\mathbf{V} + m d\mathbf{V}.$$

С учетом последнего соотношения и (2.5)

$$dT = \mathbf{V}(dm\mathbf{V} + m d\mathbf{V}) = V^2 dm + mV dV. \quad (2.6)$$

Воспользуемся определением релятивистской массы (2.2), представив ее в форме

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}. \quad (2.7)$$

Отсюда

$$m^2 c^2 = m^2 V^2 + m_0^2 c^2.$$

Дифференцируя обе части этого равенства по переменным m и V и сократив на $2m$, получим

$$c^2 dm = V^2 dm + mV dV. \quad (2.8)$$

Правые части равенств (2.6) и (2.8) совпадают. Приравняв их левые части, получим выражение, определяющее элементарное приращение кинетической энергии dT :

$$dT = c^2 dm. \quad (2.9)$$

Проинтегрировав (2.9) и полагая, что в начальный момент времени частица покоится (при этом кинетическая энергия равна нулю), а в конечный момент обладает скоростью V , найдем кинетическую энергию T релятивистской частицы:

$$T = mc^2 - m_0 c^2, \quad (2.10)$$

где m_0 — масса покоя, m — масса частицы, соответствующая скорости V (см. (2.7)).

Итак, выражение (2.10) служит определением кинетической энергии релятивистской частицы.

Закон взаимосвязи массы и энергии. Согласно (2.9) при сообщении телу (частице) кинетической энергии dT ее масса возрастает на величину dm , причем так, что приращение массы dm прямо пропорционально приращению кинетической энергии dT :

$$dm = \frac{dT}{c^2} \propto dT.$$

Здесь значок \propto использован для обозначения прямой пропорциональной зависимости.

Эйнштейн предположил, что масса будет возрастать не только при увеличении кинетической энергии, но и при любом увеличении общего запаса энергии тела, независимо от того, за счет какого конкретного вида энергии это увеличение происходит. Согласно сделанному предположению полная энергия E тела равна:

$$E = mc^2, \quad (2.11)$$

где c — скорость света в вакууме, m — масса обладающей скоростью V релятивистской частицы, вычисляемая по формуле (2.2). Уравнение (2.11) представляет собой **закон взаимосвязи массы m и полной энергии E тела**, установленный Эйнштейном.

Энергией покоя или *собственной энергией* тела называется величина m_0c^2 . Энергия покоя вычисляется по формуле (2.11) для полной энергии тела в предположении, что скорость тела равна нулю, и масса m равна массе покоя m_0 .

Из полученного ранее выражения (2.10) для кинетической энергии частицы и уравнения Эйнштейна (2.11) можно получить другую форму закона взаимосвязи массы и энергии:

$$E = m_0c^2 + T, \quad (2.12)$$

где m_0c^2 — энергия покоя, T — кинетическая энергия тела.

Связь между энергией и импульсом частицы. Чтобы установить связь между полной энергией E частицы и ее импульсом p , необходимо воспользоваться уравнением Эйнштейна (2.11), определяющим полную энергию, и уравнением (2.1), определяющим импульс релятивистской частицы:

$$\begin{aligned} E &= mc^2, \\ \mathbf{p} &= m\mathbf{V}. \end{aligned}$$

Исключим из этих двух уравнений скорость V , которая входит во второе уравнение в явном виде и в оба уравнения через релятивистскую массу m , вычисляемую по формуле (2.2). С этой целью вычислим

$$\begin{aligned} E^2 - p^2 c^2 &= m^2 c^4 - m^2 V^2 c^2 = \\ &= m^2 c^4 \left(1 - \frac{V^2}{c^2}\right) = \frac{m_0^2 c^4}{1 - V^2/c^2} \left(1 - \frac{V^2}{c^2}\right) = m_0^2 c^4. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что связь между полной энергией E и импульсом p релятивистской частицы устанавливается выражением:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4. \quad (2.13)$$

Формула (2.13) используется ниже при изучении эффекта Комптона (см. § 4) и волны де Бройля (§ 5).

Из (2.13) с учетом (2.12) найдем связь между кинетической энергией T и импульсом p релятивистской частицы:

$$pc = \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4} = \sqrt{(T + m_0 c^2)^2 - m_0^2 c^4} = \sqrt{T(T + 2m_0 c^2)}. \quad (2.14)$$

Если кинетическая энергия T частицы мала по сравнению с энергией покоя $m_0 c^2$, $T \ll m_0 c^2$, то в (2.14) слагаемым $2m_0 c^2$ можно пренебречь по сравнению с T :

$$pc \approx \sqrt{2m_0 c^2 T}.$$

Отсюда

$$T \approx \frac{p^2}{2m_0}. \quad (2.15)$$

Равенство, аналогичное (2.15), строго выполняется для любой материальной точки в классической механике. Следовательно релятивистская механика переходит в классическую в предельном случае малых по сравнению со скоростью света c скоростей и малых по сравнению с энергией покоя $m_0 c^2$ кинетических энергий тел.

Свойства частиц с нулевой массой покоя. Из формул $E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}$ и $p = \frac{m_0 V}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}$ для полной энергии и импульса релятивистской частицы следует, что если масса покоя частицы равна нулю, $m_0 = 0$, такая частица может обладать отличными от нуля полной энергией E и импульсом p только при условии, что ее скорость V равна скорости света c : $V = c$. Примером такой частицы служит фотон — квант электромагнитного излучения (см. гл. III).

Связь между полной энергией E и импульсом p частицы с нулевой массой покоя следует из (2.13) при $m_0 = 0$:

$$E = pc. \quad (2.16)$$

Ранее полученное выражение для импульса единицы объема. электромагнитного излучения $K_{\text{ед. об}}$ (см. кн. 4 «Колебания и волны. Оптика», § 17):

$$K_{\text{ед. об}} = \frac{w}{c},$$

где w — объемная плотность энергии электромагнитного поля, c — скорость света в вакууме, находится в соответствии с релятивистской формулой (2.16).

Задачи

1.1. Найти собственную длину стержня, если в лабораторной системе отсчета его скорость $V = c/2$, длина $l = 1$ м и угол между ним и направлением движения $\theta = 45^\circ$.

1.2. Стержень пролетает с постоянной скоростью мимо метки, неподвижной в K -системе отсчета. Время пролета $\Delta t = 20$ нс в K -системе. В системе же отсчета, связанной со стержнем, метка движется вдоль него в течение $\Delta t' = 25$ нс. Найти собственную длину стержня.

1.3. Собственное время жизни некоторой нестабильной частицы $\Delta t_0 = 10$ нс. Какой путь пролетит эта частица до распада в лабораторной системе отсчета, где ее время жизни $\Delta t = 20$ нс?

1.4. В плоскости xy K -системы отсчета движется частица, проекции скорости которой равны V_x и V_y . Найти скорость V' этой частицы в K' -системе, которая перемещается со скоростью V относительно K -системы в положительном направлении ее оси x .

1.5. Два стержня одинаковой собственной длины l_0 движутся в продольном направлении навстречу друг другу параллельно общей оси с одной и той же скоростью V относительно лабораторной системы отсчета. Чему равна длина каждого стержня в системе отсчета, связанной с другим стержнем?

1.6. Плотность покоящегося тела равна ρ_0 . Найти скорость системы отсчета относительно данного тела, в которой его плотность будет на $\eta = 25\%$ больше ρ_0 .

1.7. Какую работу надо совершить, чтобы увеличить скорость частицы с массой m от 0,60 с до 0,80 с? Сравнить полученный результат со значением, вычисленным по нерелятивистской формуле.

1.8. Найти зависимость импульса частицы с массой m от ее кинетической энергии. Вычислить импульс протона с кинетической энергией 500 МэВ.

1.9. Частица массы m в момент $t = 0$ начинает двигаться под действием постоянной силы \mathbf{F} . Найти скорость частицы и пройденный ею путь в зависимости от времени t .

КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ

К началу XX в. в физике были накоплены обширные опытные данные, объяснить которые классическая теория оказалась неспособной. Они охватывали широкий круг физических проблем, в частности, фотоэффект, изменение частоты рентгеновского излучения при его рассеянии веществом (эффект Комптона), дифракцию электронов и другие. Для объяснения этих явлений оказалось необходимым пересмотреть основные представления классической физики.

§ 3. Фотоэффект

Фотоэффектом называется явление вырывания электронов из вещества под действием электромагнитного излучения.

Фотоэффект был открыт в 1887 г. немецким физиком Г. Герцем (1857–1894), обнаружившим, что освещение ультрафиолетовым светом отрицательного электрода облегчает проскакивание искры между находящимися под напряжением металлическими электродами. Первое теоретическое объяснение законов фотоэффекта дал А. Эйнштейн в 1905 г.

Различают *внешний* и *внутренний* фотоэффект. При внешнем фотоэффекте электроны освобождаются светом из поверхностного слоя вещества (металла, диэлектрика, полупроводника) и переходят в другую среду, в частности, в вакуум. При внутреннем фотоэффекте оптически возбуждаемые электроны остаются внутри освещаемого тела, вызывая изменение его свойств. Внутренний фотоэффект имеет место в полупроводниках и диэлектриках. Так, в полупроводниках под действием света электроны переходят из валентной зоны в зону проводимости, что может привести к возникновению фотопроводимости, фотозлектродвижущей силы и другим эффектам. В дальнейшем изложении в основном затрагиваются закономерности, наблюдаемые при внешнем фотоэффекте на поверхности металлов.

Рассмотрим схему одного из опытов, в котором регистрируется фотоэффект (рис. 6). Две параллельные металлические пластины *A* и *B* располагаются внутри откачанной до высокого вакуума прозрачной (кварцевой) колбы. На пластины подается напряжение $U = \varphi_B - \varphi_A$, где φ_B и φ_A — потенциалы пластин *B* и *A* соответственно. Величину и знак напряжения U можно менять. Сила тока i в цепи измеряется

гальванометром Γ . Лучи от источника света S освещают пластину B . Свет монохроматический, его частоту можно плавно менять.

Если пластина B не освещена, то при любом U ток в цепи отсутствует. Если осветить пластину B , то при определенных значениях U по цепи будет течь электрический ток. Объяснение опыта состоит в следующем. Под действием электромагнитной волны из металла (пластина B) вырываются электроны, в результате чего в пространстве между пластинами появляются носители тока. Если на пластины подано напряжение, и электроны, вырванные из пластины B , достигают пластины A , то гальванометр регистрирует наличие тока в цепи.

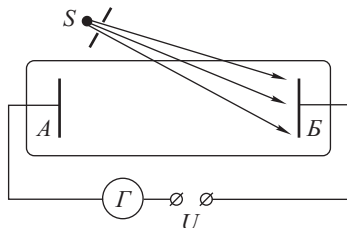


Рис. 6

Сила тока i зависит от напряжения U и кинетической энергии вырванных электронов. Если $U = \varphi_B - \varphi_A < 0$ (пластина B заряжена отрицательно, пластина A — положительно), то вырванные электроны благодаря электрическому полю отталкиваются от пластины B и притягиваются к пластине A . В этих условиях практически все покинувшие металл электроны независимо от величины их начальной кинетической энергии достигнут пластины A . Напротив, если $U = \varphi_B - \varphi_A > 0$ (пластина B заряжена положительно, пластина A — отрицательно), и скорость вырванного электрона направлена от B к A , то электрон движется против сил электрического поля и достигнет пластины A при выполнении условия:

$$T_{\text{вырв}} = \frac{mV^2}{2} > eU,$$

где m — масса, e — модуль заряда электрона. Это условие означает, что кинетическая энергия вырванного электрона, обозначенная через $T_{\text{вырв}}$, превышает величину работы против сил электрического поля eU на пути электрона от B к A . При постоянной интенсивности света с увеличением напряжения U доля электронов, обладающих достаточной для достижения пластины A кинетической энергией, уменьшается. Поэтому чем выше U , тем меньше сила тока i .

Начиная с некоторого напряжения $U = U_0$ сила тока i становится равной нулю. Это происходит, когда

$$T_{\text{вырв}} = eU_0. \quad (3.1)$$

Напряжение U_0 , начиная с которого электрический ток в рассматриваемой цепи прекращается, называется *запирающим потенциалом*. Таким образом, запирающий потенциал U_0 характеризует максимальную кинетическую энергию электронов, вырываемых из металла электромагнитным излучением.

Противоречия между классической теорией и опытом. Рассмотрим классическую модель взаимодействия электромагнитного излучения со слабо связанными электронами вещества (например, валентными электронами металла), которую можно использовать для объяснения фотоэффекта. Будем считать электроны проводимости в металле практически свободными, и запишем уравнение движения электрона с учетом только силы его взаимодействия с электрическим полем электромагнитной волны \mathbf{E} :

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= eE, \\ m\ddot{x} &= eA \cos \omega t. \end{aligned}$$

Здесь направление координатной оси x выбрано параллельно вектору напряженности \mathbf{E} , \ddot{x} — ускорение электрона, $E = A \cos \omega t$ — проекция на ось x вектора \mathbf{E} , A — амплитуда, ω — циклическая частота волны. Под действием поля волны электрон будет совершать гармонические колебания, «раскачиваться».

Проинтегрировав уравнение, найдем скорость электрона V_x :

$$V_x = \dot{x} = \frac{eA}{m\omega} \sin \omega t,$$

и его кинетическую энергию T :

$$T = \frac{mV_x^2}{2} = \frac{e^2 A^2}{2m\omega^2} \sin^2 \omega t.$$

С учетом того что интенсивность I волны пропорциональна квадрату ее амплитуды A , из полученного выражения следует: кинетическая энергия T электрона, приобретенная в результате взаимодействия с электромагнитной волной, пропорциональна интенсивности I и обратно пропорциональна квадрату частоты ω волны:

$$T \propto \frac{I}{\omega^2}. \quad (3.2)$$

Сравним результаты опытов (см. рис. 6) с выводами рассмотренной модели.

Опыт 1. Зависимость силы тока i от интенсивности I падающего на пластину B света.

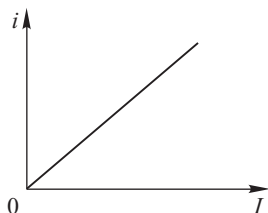


Рис. 7

Как показывает опыт, при фиксированном значении U сила тока i прямо пропорциональна интенсивности света I (рис. 7). Этот результат согласуется с рассмотренной моделью. Согласно (3.2) с увеличением I растет кинетическая энергия электронов T , вследствие чего увеличивается вероятность вырывания электрона из металла, растет число вырванных электронов и наблюдается увеличение силы тока i .

Опыт 2. Зависимость силы тока i от напряжения U .

На рис. 8 показаны графики зависимости силы тока i от приложенного к пластинам напряжения U для двух опытов, в каждом из которых интенсивность света I_1 и I_2 поддерживается постоянной. Как видно из рисунка, при отрицательных U ток быстро достигает своего максимального значения, которое называется *током насыщения*, и перестает зависеть от U . При определенном положительном напряжении $U = U_0$ (запирающий потенциал) ток в цепи прекращается. Значение U_0 в обоих опытах одинаковое, следовательно, запирающий потенциал не зависит от интенсивности света I .

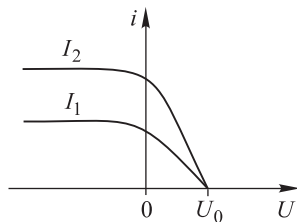


Рис. 8

Согласно (3.1) U_0 характеризует максимальную кинетическую энергию вырванных электронов $T_{\text{вырв}}$. Результаты опыта показывают, что $T_{\text{вырв}}$ не зависит от интенсивности света I . Это противоречит выводу классической модели о том, что кинетическая энергия T электронов пропорциональна интенсивности света I (см. (3.2)).

Опыт 3. Зависимость запирающего потенциала U_0 от частоты излучения ω .

Свет, падающий на пластину B (см. рис. 6), монохроматический, его частоту ω можно плавно менять. При измерении зависимости U_0 от ω (рис. 9) было получено: а) запирающий потенциал U_0 является линейной функцией частоты и с увеличением ω растет; б) если ω становится меньше некоторой величины ω_0 , фотоэффект вообще не наблюдается. Граничная частота ω_0 для каждого металла своя.

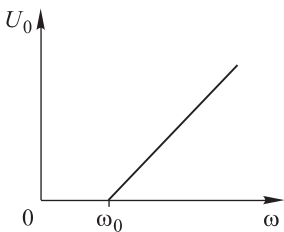


Рис. 9

Наименьшая частота ω_0 (и соответствующая ей длина волны λ_0) электромагнитного излучения, способного вызвать фотоэффект, получили название *красной границы фотоэффекта*.

Противоречия результатов данного опыта с рассмотренной выше классической моделью таковы. В модели кинетическая энергия T взаимодействующих с электромагнитной волной электронов (см. (3.2)), и следовательно, максимальная кинетическая энергия вырванных из металла электронов $T_{\text{вырв}}$, характеристикой которой служит запирающий потенциал U_0 , должны зависеть от частоты ω по закону $1/\omega^2$. Напротив, согласно опыту, U_0 является линейной возрастающей функцией частоты (см. рис. 9). Кроме этого, классическая модель не предполагает существование обнаруженной в опыте красной границы фотоэффекта.

В 1905 г. А. Эйнштейном (1879–1955) была создана квантовая теория фотоэффекта, позволившая преодолеть описанные противоречия.

Квантовая теория фотоэффекта. Электромагнитную волну при ее взаимодействии с веществом, в частности при фотоэффекте, следует рассматривать как поток частиц (корпускул), называемых *квантами электромагнитного излучения* или *фотонами*.

Энергия фотона E определяется только частотой ω электромагнитной волны:

$$E = \hbar\omega, \quad (3.3)$$

где \hbar — коэффициент пропорциональности, называемый *постоянной Планка*, $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж · с. Соотношение (3.3) представляет собой постулат квантовой теории света. Предположение о том, что электромагнитное излучение испускается в виде отдельных порций энергии (квантов), величина которых пропорциональна частоте излучения, было сделано Планком (1858–1947) в 1900 г. при вычислении испускательной способности абсолютно черного тела (см. гл. VII).

Используя (3.3) и формулу связи между энергией и импульсом релятивистской частицы (2.13) с нулевой массой покоя ($m_0 = 0$), можно установить соотношение между импульсом фотона и длиной световой волны λ или волновым числом k :

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 = p^2 c^2, \\ p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k,$$

или в векторной форме:

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad (3.4)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор, $k = 2\pi/\lambda$.

Интенсивность I электромагнитной волны, то есть средняя плотность потока переносимой волной энергии, пропорциональна числу содержащихся в ней фотонов и их потоку.

Квантовый механизм фотоэффекта состоит в следующем. Каждый фотон взаимодействует с одним электроном вещества. В результате фотон поглощается, передавая свою энергию электрону (поскольку электрон проводимости, строго говоря, не является свободным, часть энергии кванта всегда передается кристаллу). Если приобретенная электроном энергия достаточно велика, он способен пересечь границу металла (его поверхность) и выйти во внешнюю среду.

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта выражает закон сохранения энергии в процессе поглощения фотона веществом:

$$\hbar\omega = T_{\text{вырв}} + A, \quad (3.5)$$

где $\hbar\omega$ — энергия фотона, $T_{\text{вырв}}$ — кинетическая энергия вышедшего во внешнюю среду электрона, A — так называемая *работа выхода* электрона из металла.

Работа выхода — это минимальная кинетическая энергия, которую необходимо сообщить электрону проводимости для того, чтобы он мог пересечь поверхностный слой металла и выйти во внешнюю среду.

Необходимость совершения работы A обусловлена имеющимся вблизи поверхности металла электрическим полем, которое препятствует выходу во внешнюю среду отрицательно заряженных частиц. Каждое вещество характеризуется своей работой выхода, которая зависит как от особенностей строения кристаллической решетки, так и от состояния поверхности. Величина A , как правило, составляет несколько электронвольт. У алюминия и цинка она равна 3,74 эВ, у железа 4,36 эВ, у цезия 1,89 эВ. Работу выхода можно значительно понизить нанесением на поверхность вещества специальных покрытий.

С помощью уравнения Эйнштейна (3.5) удастся объяснить закономерности опытов по фотоэффекту.

Опыт 1. Росту интенсивности света I соответствует увеличение количества падающих в единицу времени на поверхность металла фотонов и актов их последующего взаимодействия с электронами. В результате число вырванных из металла электронов и регистрируемая при фотоэффекте сила тока i увеличиваются (рис. 7).

Опыт 2. Согласно (3.5) максимальная кинетическая энергия $T_{\text{вырв}}$ покинувших металл электронов зависит только от частоты ω электромагнитной волны и работы выхода A :

$$T_{\text{вырв}} = \hbar\omega - A. \quad (3.6)$$

С учетом связи (3.1) между $T_{\text{вырв}}$ и U_0 можно утверждать, что только параметрами ω и A определяется и запирающий потенциал U_0 . Интенсивность потока падающих на поверхность металла квантов (интенсивность света I) не должна оказывать влияния на U_0 , что и наблюдалось в опыте (см. рис. 8).

Опыт 3. С помощью уравнения Эйнштейна для фотоэффекта получают объяснение и результаты, представленные на рис. 9. Согласно (3.6) $T_{\text{вырв}}$ и, соответственно, U_0 (см. (3.1)), линейно возрастают с увеличением ω . Наименьшая частота световой волны, под действием которой электрон еще способен покинуть металл, определяется уравнением:

$$\begin{aligned} T_{\text{вырв}} &= 0, \\ 0 &= \hbar\omega_0 - A. \end{aligned}$$

Отсюда найдем ω_0 — красную границу фотоэффекта:

$$\omega_0 = \frac{A}{\hbar}.$$

Приведем некоторые экспериментальные данные. Для чистых поверхностей большинства металлов работа выхода A превышает 3 эВ. Поэтому фотоэффект наблюдается в ультрафиолетовой, а для щелочных металлов — также и видимой области спектра. Свет проникает в металл на глубину $\sim 10^{-5}$ см. Фотоэлектроны при движении к поверхности взаимодействуют с невозбужденными электронами проводимости и быстро теряют энергию, полученную от излучения. Энергию,

достаточную для совершения работы выхода A , сохраняют только те фотоэлектроны, которые образуются вблизи поверхности металла на глубине, не превышающей $\sim 10^{-7}$ см.

Учитывая, что предложенная Эйнштейном квантовая теория света позволила объяснить все закономерности, наблюдавшиеся при экспериментальном исследовании фотоэффекта, можно утверждать, что свет, распространяющийся в пространстве как электромагнитная волна, при фотоэффекте обнаруживает корпускулярные свойства.

§ 4. Эффект Комптона

Эффект Комптона имеет место при упругом рассеянии электромагнитного излучения на свободных и слабо связанных электронах вещества и состоит в увеличении длины волны рассеянного излучения (λ') по сравнению с длиной волны первичного излучения (λ). Эффект наблюдается для рентгеновского ($\lambda \sim 0,1$ нм) и гамма-излучения ($\lambda < 0,1$ нм). Открыт в 1922 г. американским физиком А. Комптоном (1892–1962) при исследовании рассеяния рентгеновских лучей на парафине и графите. Изменение длины волны при рассеянии излучения называется *комптоновским смещением*. Опыт показал, что величина смещения $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ не зависит от природы рассеивающего вещества и длины волны λ падающего излучения, а определяется только углом рассеяния θ (угол между направлениями рассеянного излучения и первичного пучка). В эффекте Комптона проявляются корпускулярные свойства электромагнитного излучения.

Согласно классической теории взаимодействия электромагнитных волн с веществом длина волны излучения при рассеянии меняться не должна. Действительно, под действием периодического электрического поля волны электрон колеблется с частотой, равной частоте колебаний поля, и потому должен излучать вторичные волны (рассеянное излучение) такой же частоты.

Согласно представлениям квантовой теории электромагнитная волна представляет собой поток частиц — фотонов (электромагнитных квантов). Каждый фотон характеризуется определенной энергией $E = \hbar\omega$ и импульсом \mathbf{p} . Эффект Комптона наблюдается при упругом столкновении двух частиц — налетающего фотона и покоящегося электрона. В каждом акте столкновения соблюдаются законы сохранения энергии и импульса. Фотон передает часть своей энергии и импульса электрону и изменяет направления движения — рассеивается. Уменьшение энергии фотона соответствует увеличению длины волны рассеянного излучения. Электрон в результате взаимодействия с фотоном приходит в движение или, как говорят, испытывает отдачу. При рассеянии фотонов высокой энергии электрон отдачи может приобрести значительную скорость, так что необходимо учитывать релятивистскую зависимость энергии и импульса электрона от его скорости.

Рисунок 10 иллюстрирует процесс упругого рассеяния фотона на свободном электроне. Изображены: налетающий фотон с импульсом \mathbf{p} и покоящийся электрон, обозначенный как e (рис. 10 а); рассеянный под углом θ фотон с импульсом \mathbf{p}' и электрон отдачи с импульсом \mathbf{p}_e (рис. 10 б). Введем обозначения: ω , ω' — частота первичного и рассеянного электромагнитного излучения, $\hbar\omega$, $\hbar\omega'$ — энергия налетающего и рассеянного фотона соответственно; m_0 — масса покоя электрона, m_0c^2 — энергия покоящегося электрона; E_e — энергия электрона отдачи.

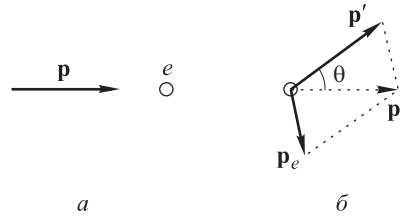


Рис. 10

При столкновении фотона с электроном выполняются закон сохранения энергии:

$$\hbar\omega + m_0c^2 = \hbar\omega' + E_e, \quad (4.1)$$

и закон сохранения импульса:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + \mathbf{p}_e. \quad (4.2)$$

Учтем релятивистскую связь между энергией E_e и импульсом p_e электрона отдачи (см. (2.13)):

$$E_e^2 = p_e^2c^2 + m_0^2c^4. \quad (4.3)$$

Из треугольника импульсов (см. рис. 10 б), соответствующего векторному равенству (4.2), получим

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - pp' \cos \theta. \quad (4.4)$$

Учтем связь между энергией и импульсом первичного и рассеянного фотонов:

$$p = \frac{\hbar\omega}{c}, \quad p' = \frac{\hbar\omega'}{c}. \quad (4.5)$$

Подставим p и p' из (4.5) в (4.4), p_e^2 из (4.4) в (4.3), E_e^2 из (4.3) в преобразованное уравнение (4.1):

$$\begin{aligned} (\hbar\omega + m_0c^2 - \hbar\omega')^2 &= E_e^2, \\ (\hbar\omega + m_0c^2 - \hbar\omega')^2 &= p_e^2c^2 + m_0^2c^4, \\ (\hbar\omega + m_0c^2 - \hbar\omega')^2 &= (p^2 + p'^2 - pp' \cos \theta)c^2 + m_0^2c^4, \\ (\hbar\omega + m_0c^2 - \hbar\omega')^2 &= \left(\left(\frac{\hbar\omega}{c} \right)^2 + \left(\frac{\hbar\omega'}{c} \right)^2 - 2 \frac{\hbar\omega}{c} \frac{\hbar\omega'}{c} \cos \theta \right) c^2 + m_0^2c^4. \end{aligned}$$

После возведения в квадрат и приведения подобных членов имеем

$$m_0c^2(\omega - \omega') = \hbar\omega\omega'(1 - \cos \theta).$$

Подставив в это равенство частоты ω и ω' первичного и рассеянного излучения, выраженные через соответствующие длины волн λ и λ' , найдем приращение $\Delta\lambda$ длины волны излучения при рассеянии (*формула Комптона*):

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_0c} (1 - \cos\theta),$$

или

$$\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta). \quad (4.6)$$

Здесь величина

$$\lambda_C = \frac{2\pi\hbar}{m_0c} \quad (4.7)$$

называется *комптоновской длиной волны* электрона. Она равна $\lambda_C \approx \approx 0,2426 \cdot 10^{-11}$ м.

Согласно (4.6) смещение $\Delta\lambda$ зависит от угла рассеяния θ , является наибольшим при $\theta = 180^\circ$ ($\Delta\lambda = 2\lambda_C$) и не зависит от длины волны первичного излучения λ , что полностью согласуется с опытом.

При выводе формулы Комптона (4.6) рассматривалось рассеяние на свободных электронах, поэтому естественно, что в нее не входят характеристики вещества, на котором происходит рассеяние рентгеновских лучей.

Формула (4.6) остается справедливой при упругом рассеянии фотона на любой частице, например, атоме как целом. В этом случае в выражение (4.7) комптоновской длины волны входит масса рассеивающей частицы, в частности, атома.

При рассеянии фотонов на электронах, связь которых с атомом велика (внутренние электроны тяжелых атомов), обмен энергией и импульсом происходит с атомом как целым. Масса атома намного превосходит массу электрона, а комптоновская длина волны атома ничтожно мала (см. (4.7)). В этом случае длины волн рассеянного и первичного излучения практически совпадают ($\lambda' = \lambda$). Благодаря сильно связанным электронам в рассеянном излучении наряду со смещенной компонентой (длина волны λ') присутствует несмещенная (длина волны λ).

Свойства рассеивающего вещества в опытах по комптоновскому рассеянию проявляются в соотношении интенсивностей смещенной и несмещенной компонент. В легких веществах, например, Li, Be, B, энергия связи электрона в атоме мала по сравнению с энергией рентгеновского кванта, так что все электроны можно считать свободными. По мере роста атомного номера увеличивается относительное число электронов с сильной связью, чем и обуславливается относительное увеличение интенсивности несмещенной компоненты по сравнению со смещенной.

Относительные интенсивности смещенной и несмещенной компонент зависят от угла рассеяния θ . Кинетическая энергия электрона отдачи увеличивается с увеличением угла рассеяния фотона. Так,

например, наибольшую энергию электрон приобретает в результате лобового столкновения, при этом $\theta = 180^\circ$. Электрон можно считать свободным, если приобретаемая им кинетическая энергия велика по сравнению с энергией связи электрона в атоме. Следовательно, при увеличении угла рассеяния θ увеличивается относительная доля практически свободных электронов, а с ней и относительная интенсивность смещенной компоненты.

Из всего сказанного ясно, что в явлении, которое получило название эффекта Комптона, корпускулярные свойства электромагнитного излучения проявляются особенно отчетливо.

Итак, электромагнитное излучение обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами (*корпускулярно-волновой дуализм*). Волновые свойства находят свое выражение в законах распространения, интерференции и дифракции электромагнитных волн, а корпускулярные — проявляются при взаимодействии излучения с веществом.

§ 5. Волновые свойства частиц

Микроскопические частицы вещества, в частности электроны, при определенных условиях обнаруживают волновые свойства.

Дифракция электронов была обнаружена в опыте американских физиков Л. Дэвиссона (1881–1958) и Л. Джермера (1896–1971) в 1927 г. Параллельный пучок электронов, испускаемых раскаленной нитью и ускоренных разностью потенциалов $U = 50 \div 100$ В, направлялся на монокристалл никеля (рис. 11). Рассеянные электроны улавливались соединенным с гальванометром детектором, который можно было устанавливать под любым углом к направлению падающего пучка. По регистрируемой силе тока судили об интенсивности электронного пучка, рассеянного в том или ином направлении. Оказалось, что при изменении θ максимумы и минимумы интенсивности чередуются.

Подобное пространственное распределение интенсивности типично для рассеяния электромагнитных (рентгеновских) волн.

Испытавшие зеркальное отражение от параллельных атомных плоскостей рентгеновские волны испытывают дифракцию. Они усиливают друг друга, если выполнено так называемое условие Брэгга (1890–1971) и Вульфа (1863–1925), когда оптическая разность хода отраженных от соседних плоскостей интерферирующих лучей равна целому числу длин волн:

$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad (5.1)$$

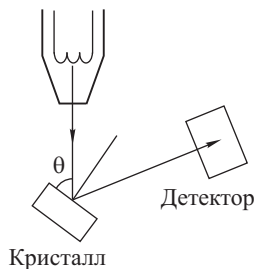


Рис. 11

где d — межплоскостное расстояние, θ — угол скольжения, λ — длина волны излучения, $2d \sin \theta$ — оптическая разность хода лучей, отраженных от соседних атомных плоскостей, m — целое число (рис. 12).

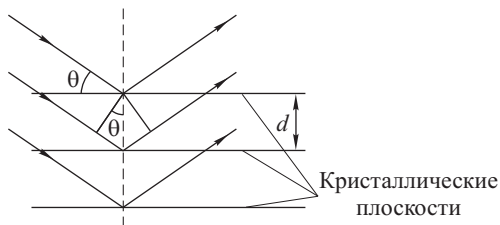


Рис. 12

В опыте Дэвиссона и Джермера было обнаружено, что при заданном θ максимумы интенсивности пучка рассеянных электронов наблюдаются только при определенных значениях ускоряющего потенциала U , то есть при определенных энергиях электронов (рис. 13). Такие же

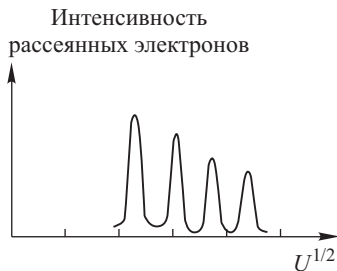


Рис. 13

дифракционные максимумы и минимумы возникают в опытах по рассеянию рентгеновских лучей на кристаллах при фиксированном угле скольжения θ в зависимости от частоты (длины волны) рентгеновского излучения (см. (5.1)).

Найденные Дэвиссоном и Джермером закономерности свидетельствуют о том, что движущиеся частицы (электроны) обладают явно выраженными волновыми свойствами и подчиняются законам интерференции и дифракции.

В дальнейших экспериментальных ис-

следованиях было показано, что волновые свойства присущи не только электронам, но и другим микрочастицам, а также атомам и молекулам.

Французский физик де Бройль (р. 1892) высказал предположение (1924 г.), одним из подтверждений которого послужили опыты Дэвиссона и Джермера, согласно которому корпускулярно-волновой дуализм (наличие как волновых, так и корпускулярных свойств), обнаруженный ранее у фотонов (фотоэффект, эффект Комптона), присущ всем частицам — электронам, протонам, атомам, молекулам и т. д. Согласно гипотезе де Бройля, *всякой движущейся частице независимо от ее природы и размеров можно поставить в соответствие волну (волна де Бройля)*.

Волна де Бройля, вообще говоря, не электромагнитной природы. Она характеризует вероятность того или иного состояния частицы и является «волной вероятности». Однако волна де Бройля фотона совпадает с электромагнитной волной (уравнения волны де Бройля

фотона и световой волны отличаются лишь коэффициентом пропорциональности).

В квантовой механике состояния физических систем описываются так называемыми *волновыми функциями* или *ψ -функциями*. Волна де Бройля — частный случай волновой функции: это волновая функция свободно движущейся частицы.

Длина волны де Бройля. Для любой движущейся частицы постулируются такие же соотношения между ее энергией E и импульсом p , с одной стороны, и частотой ω и волновым числом k волны де Бройля, с другой, какие имеют место для фотона и электромагнитной волны (см. (3.3), (3.4)). Приведем эти соотношения.

Параметры электромагнитной волны: ω — циклическая частота; $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число (λ — длина волны). Параметры фотона и их связь с параметрами электромагнитной волны: $E = \hbar\omega$ — энергия; $p = \hbar k = 2\pi\hbar/\lambda$ — импульс.

В случае фотона соотношение между E и ω представляет собой постулат квантовой теории света, а соотношение между p и k следует из формулы $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$ (см. (2.13)), связывающей между собой энергию и импульс релятивистской частицы с нулевой массой покоя ($m_0 = 0$).

Согласно гипотезе де Бройля в точности такие соотношения должны быть распространены на любую движущуюся частицу с энергией E и импульсом p :

$$E = \hbar\omega, \quad (5.2)$$

$$p = \hbar k. \quad (5.3)$$

Здесь ω и k — частота и волновое число волны де Бройля.

Длина волны де Бройля λ любой частицы, обладающей импульсом p , определяется формулой:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (5.4)$$

которая следует из (5.3). Справедливость гипотезы де Бройля и, в частности, формулы (5.4), подтверждается опытами Дэвисона и Джермера.

Пример 1. Вычислим длину волны де Бройля электрона, ускоренного разностью потенциалов $U=50$ В, что характерно для опытов Дэвиссона и Джермера. Приобретенная электроном под действием поля кинетическая энергия eU выражается через его импульс p :

$$eU = \frac{p^2}{2m}.$$

Здесь e и m — модуль заряда и масса электрона соответственно. Отсюда выразим импульс p :

$$p = \sqrt{2meU},$$

и затем найдем длину волны де Бройля λ с помощью (5.4):

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} \approx 1,6 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Такую же длину волны имеет рентгеновское излучение. Поэтому дифракционная картина для электронов, рассеянных кристаллом никеля, похожа на дифракционную картину, наблюдавшуюся при рассеянии на том же кристалле рентгеновских лучей. В частности, максимумы интенсивности рассеянных кристаллом электронов наблюдаются при таких U и соответствующих λ (см. рис. 13), для которых выполняется условие Брэгга-Вульфа (5.1).

Пример 2. Пылинке массой $m = 1$ мг, движущейся со скоростью $V = 0,1$ мкм/с, соответствует волна де Бройля длины

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mV} \sim 10^{-20} \text{ м.}$$

Такое значение λ находится за пределами доступной наблюдению области. Поэтому при движении макроскопических объектов волновые свойства тел оказываются несущественными.

Уравнение волны де Бройля. Распространение микрочастиц в пространстве происходит так, как если бы их движение описывалось волнами.

Уравнение плоской электромагнитной волны в комплексной форме имеет вид

$$E = E_m e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} = E_m e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar}, \quad (5.5)$$

здесь E — напряженность электрического поля, E_m — комплексная амплитуда, ω и \mathbf{k} — циклическая частота и волновой вектор (параметры волны), $E = \hbar\omega$ и $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ — энергия и импульс фотона (параметры частицы). Уравнение (5.5) с точностью до постоянного множителя совпадает с уравнением волны де Бройля фотона.

Уравнение плоской волны де Бройля любой частицы, обладающей энергией E и импульсом \mathbf{p} , записывается по аналогии с (5.5):

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar}. \quad (5.6)$$

Здесь ψ_0 — амплитуда волны (постоянная величина).

Остановимся на основных свойствах волны де Бройля.

1. Плоская волна де Бройля (5.6) соответствует частице с определенными (фиксированными) энергией E и импульсом \mathbf{p} , то есть движущейся в свободном от силовых полей пространстве.

2. Волны де Бройля распространяются, интерферируют и дифрагируют по обычным законам волновой оптики.

3. Квадрат модуля волновой функции $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ частицы представляет собой плотность вероятности ее обнаружения в точке пространства, положение которой задано радиусом-вектором \mathbf{r} , в момент времени t . Это утверждение справедливо для любой квантовомеханической вол-

новой функции, а не только волны де Бройля. В случае волны (5.5) квадрат модуля волновой функции — постоянная величина:

$$|\psi(r, t)|^2 = |\psi_0 e^{-i(Et - pr)/\hbar}|^2 = |\psi_0|^2 = \text{const.}$$

Это означает, что вероятность обнаружения частицы с фиксированными E и \mathbf{p} во всех точках пространства одинакова.

Как известно из оптики, квадрат модуля амплитуды плоской волны пропорционален интенсивности света и, следовательно, среднему числу фотонов в данной точке пространства, а значит, вероятности обнаружения фотона в этой точке. Таким образом, рассматриваемое свойство 3 волны де Бройля действительно выполняется для фотонов.

4. Вычислим фазовую и групповую скорости некоторых волн де Бройля.

Фазовая и групповая скорости волны де Бройля фотона в вакууме соответственно равны

$$V_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = c, \quad (5.7)$$

$$V_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = c. \quad (5.8)$$

Эти скорости совпадают друг с другом и со скоростью света c ($c \approx 3 \cdot 10^8$ м/с).

Рассмотрим нерелятивистскую частицу, которая движется в вакууме со скоростью V и обладает энергией $E = p^2/(2m)$, где m — масса, $p = mV$ — импульс частицы. Ее фазовая скорость равна

$$V_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{p^2/(2m)}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{V}{2}, \quad (5.9)$$

что вдвое меньше скорости самой частицы.

Групповая скорость равна

$$V_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d(p^2/(2m))}{dp} = \frac{p}{m} = V, \quad (5.10)$$

она совпадает со скоростью V частицы, но отличается от фазовой скорости (5.9) волны де Бройля.

Отличия между групповой и фазовой скоростью в рассматриваемом случае подразумевают, что имеет место дисперсия волн де Бройля в вакууме.

§ 6. Принцип неопределенности

Принцип неопределенности открыт немецким физиком В. Гейзенбергом (1901–1976) в 1927 г., что явилось важным этапом развития квантовой физики. Существенной чертой микроскопических объектов является их корпускулярно-волновая природа. Состояние частицы полностью определяется ее волновой функцией. Частица может быть об-

наружена в любой точке пространства, где волновая функция отлична от нуля. Поэтому результаты экспериментов по измерению координаты имеют вероятностный характер. Это означает, что при проведении нескольких опытов с одной и той же частицей каждый раз получаются иные результаты. Однако некоторые значения будут появляться чаще, чем другие, то есть будут более вероятными. Относительная частота появления тех или иных значений координаты пропорциональна квадрату модуля волновой функции в соответствующих точках пространства. Если волновая функция имеет четко выраженный максимум в некоторой точке, то при измерениях чаще всего будут получаться те значения координаты частицы, которые лежат вблизи максимума. Но даже в этом случае имеется разброс, то есть некоторая неопределенность, при измерении координаты, которая составляет величину порядка полуширины максимума волновой функции. То же относится и к измерению импульса частицы.

Введение понятия волновой функции частицы делает представления классической физики неприменимыми к микрообъектам: движущимся частицам нельзя приписать траекторий, то есть определенных значений координат в следующие один за другим моменты времени.

Принцип неопределенности Гейзенберга заключается в том, что координата частицы и ее импульс не могут быть измерены одновременно с абсолютной точностью. Неопределенность в измерениях обусловлена объективными свойствами материи, а не связана с недостатками экспериментальной техники.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга связывает между собой неопределенность Δx координаты и неопределенность Δp_x проекции импульса частицы. Произведение неопределенностей по порядку

величины не меньше постоянной Планка \hbar . Везде ниже будем пользоваться приближенным соотношением:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar. \quad (6.1)$$

Для обоснования (6.1) проведем мысленный эксперимент по дифракции электронов от гипотетической щели, размер которой сравним с длиной волны де Бройля (рис. 14).

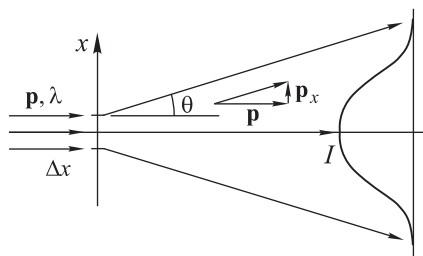


Рис. 14

Пусть пучок моноэнергетических электронов движется в направлении, перпендикулярном плоскости непрозрачного экрана, в котором имеется длинная узкая щель. Прошедшие через щель электроны регистрируются на экране наблюдения по почернению фотоэмульсионного слоя. Степень почернения в разных местах экрана тем выше, чем выше вероятность попадания туда электрона. Распределение электронов по экрану подобно пространственному распределению интенсивности I

световой волны в условиях дифракции Фраунгофера. Регистрируемую картину количественно можно описать двумя способами: а) используя свойства волны де Бройля электрона, в частности, ее способность к дифракции; б) с помощью параметров движущихся частиц, в частности, проекций импульса электронов.

Плоская волна де Бройля падает нормально на экран со щелью ширины Δx . Если экран наблюдения достаточно удален от щели, имеет место дифракция Фраунгофера. Как известно из оптики, угловая полуширина θ центрального максимума, то есть угол между направлением на максимум и на ближайший к нему минимум интенсивности (см. рис. 14), определяется условием:

$$\sin \theta \approx \frac{\lambda}{\Delta x}, \quad (6.2)$$

где $\lambda = 2\pi\hbar/p$ — длина волны де Бройля, p — импульс электрона.

Наличие на экране наблюдения максимума интенсивности с угловой полушириной θ , определяемой выражением (6.2), можно объяснить другим способом, а именно, тем обстоятельством, что первоначально параллельный пучок электронов после прохождения щели становится расходящимся. Это происходит благодаря тому, что электроны приобретают поперечную составляющую импульса p_x (см. рис. 14). Угол расхождения θ выражается через проекции импульса электрона:

$$\operatorname{tg} \theta \approx \frac{|\mathbf{p}_x|}{|\mathbf{p}|} = \frac{p_x}{p} = \frac{\Delta p_x}{p}. \quad (6.3)$$

Здесь p — первоначальный импульс (он практически не изменяется при прохождении электронов через щель); p_x — проекция импульса на ось x , перпендикулярную направлению движения пучка; Δp_x — разброс или погрешность измерения p_x . Погрешность измерения равна:

$$\Delta p_x = p_x - p_{x\text{ср}} = p_x,$$

где $p_{x\text{ср}}$ — среднее значение p_x -проекции на ось x импульса электрона; $p_{x\text{ср}} = 0$ в силу симметрии расходящегося электронного пучка.

Если дифракционное уширение пучка невелико, то $\sin \theta \approx \operatorname{tg} \theta$, и можно приравнять правые части уравнений (6.2) и (6.3):

$$\frac{\lambda}{\Delta x} \approx \frac{\Delta p_x}{p}.$$

Подставив сюда $\lambda = 2\pi\hbar/p$ (см. (5.4)), получим

$$\begin{aligned} \frac{2\pi\hbar}{p\Delta x} &\approx \frac{\Delta p_x}{p}, \\ \Delta x \cdot \Delta p_x &\approx 2\pi\hbar, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Соотношение неопределенностей, подобное (6.1), имеет место для любой пары координат и проекций импульса частицы, а именно:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \approx 2\pi\hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \approx 2\pi\hbar. \quad (6.4)$$

Математический смысл принципа неопределенности. Принцип неопределенности сам по себе не является постулатом квантовой физики. Он представляет собой математическое следствие того факта, что поведение частиц описывается волновыми функциями.

Пусть частица, которая может двигаться только вдоль оси x , находится вблизи начала координат. Измерение координаты x проведено с точностью a . Это означает, что ψ -функцию частицы можно считать отличной от нуля в области значений координаты x , заданной неравенством:

$$-a \leq x \leq a.$$

Для упрощения вычислений будем полагать, что ψ -функция в указанном промежутке приблизительно постоянная, а вне промежутка равна нулю:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_0 = \text{const} & \text{при } -a \leq x \leq a, \\ 0 & \text{при } x < -a \text{ и } x > a. \end{cases} \quad (6.5)$$

Такое определение ψ -функции означает, что обнаружить частицу в любой точке промежутка $-a \leq x \leq a$ можно с равной вероятностью. Неопределенность координаты частицы составляет величину $\Delta x \approx 2a$ (рис. 15).

Выполним *нормировку* ψ -функции. Запишем условие того, что вероятность обнаружить частицу где бы то ни было (в любой точке пространства с координатой $-\infty < x < \infty$), равна единице (*условие нормировки*):

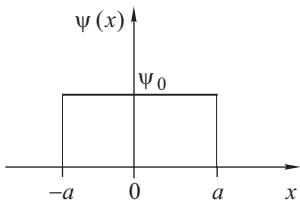


Рис. 15

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (6.6)$$

Подынтегральное выражение $|\psi(x)|^2$ представляет собой плотность вероятности, а $|\psi(x)|^2 dx$ — вероятность обнаружить частицу в интервале шириной dx вблизи точ-

ки с координатой x ; интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$ равен вероятности обнаружить частицу в любой точке пространства.

Из условия нормировки (6.6) с учетом (6.5) получим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-a}^{+a} \psi_0^2 dx = 2a\psi_0^2 = 1.$$

Отсюда

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2a}}.$$

Нормированная волновая функция частицы имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2a}} & \text{при } -a \leq x \leq a, \\ 0 & \text{при } x < -a \text{ и } x > a. \end{cases} \quad (6.7)$$

Нормированная функция не является плоской волной де Бройля, однако по теореме Фурье она может быть представлена в виде суммы (интеграла) функций вида $f(k)e^{ikx}$:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k)e^{ikx} dk, \quad (6.8)$$

где k — волновое число, $f(k)$ — зависящая от k амплитуда. Функция $f(k)$ может быть вычислена, если задана $\psi(x)$.

Каждая функция $f(k)e^{ikx}$ — это пространственная часть плоской волны де Бройля:

$$e^{-i\omega t} f(k)e^{ikx} = f(k)e^{-i(\omega t - kx)}. \quad (6.9)$$

Зависимость (6.9) от времени в виде множителя $e^{-i\omega t}$ не существенна и ее можно опустить. Таким образом, волновая функция частицы (6.7) представляется в виде суперпозиции (6.8) плоских волн де Бройля (6.9).

Поскольку каждой плоской волне $f(k)e^{ikx}$ соответствует частица с фиксированным значением волнового числа k (импульса p), функция $f(k)$ содержит в себе информацию о распределении исходной частицы, локализованной в начале координат в области ширины $\Delta x \approx 2a$, по значениям волнового числа или импульса. Следовательно, распределение частицы по координатам $\psi(x)$ полностью определяет ее распределение по импульсам $f(k)$, где $k = p/\hbar$. Связь между шириной указанных распределений Δx и Δp — это и есть соотношение неопределенностей Гейзенберга.

По теореме Фурье

$$f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\xi) e^{-ik\xi} d\xi, \quad (6.10)$$

где ξ — вспомогательная переменная. Подставив $\psi(x)$ из (6.7) в (6.10), получим

$$f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-a}^{+a} \frac{1}{\sqrt{2a}} e^{-ik\xi} d\xi = -\frac{e^{-ika} - e^{ika}}{2\pi ik\sqrt{2a}} = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \frac{\sin ka}{k},$$

или окончательно

$$f(k) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \frac{\sin ka}{k}.$$

Вычислим $|f(k)|^2$:

$$|f(k)|^2 = \frac{1}{2a\pi^2} \frac{\sin^2 ka}{k^2}. \quad (6.11)$$

Величина $|f(k)|^2$ отражает «вклад» гармонической составляющей $f(k)e^{ikx}$ в разложение $\psi(x)$ (6.8) по плоским волнам; она равна плотности вероятности обнаружить у частицы импульс $p = \hbar k$. График функции распределения $|f(k)|^2$ представлен на рис. 16.

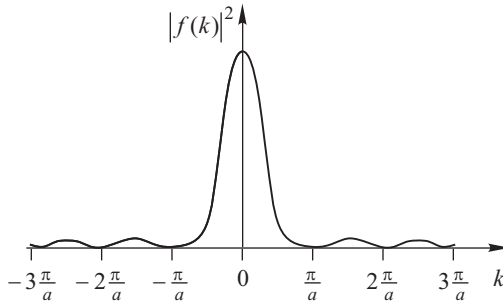


Рис. 16

Из (6.11) следует, что наибольший вклад в разложение (6.8) вносят плоские волны с волновым числом k из промежутка:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (6.12)$$

В качестве оценки ширины распределения (6.11) можно принять величину:

$$\Delta k \approx \frac{\pi}{a}.$$

Соответствующая ширина распределения по импульсам равна

$$\Delta p = \hbar \Delta k \approx \frac{\hbar \pi}{a}. \quad (6.13)$$

Если измерить импульс исходной частицы, локализованной в начале координат в области шириной $\Delta x \approx 2a$, то с наибольшей вероятностью будут получены значения из интервала (6.13). Величина Δp имеет смысл погрешности измерения или неопределенности импульса.

Произведение неопределенностей координаты $\Delta x = 2a$ и импульса Δp (6.13) равно

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx 2a \frac{\hbar \pi}{a} = 2\pi \hbar$$

и представляет собой соотношение Гейзенберга (6.1).

Задачи

2.1. Точечный изотропный источник испускает свет с $\lambda = 589$ нм. Световая мощность источника $P=10$ Вт. Найти:

а) среднюю плотность потока фотонов на расстоянии $r = 2,0$ м от источника;

б) расстояние от источника до точки, где средняя концентрация фотонов $n = 100$ см⁻³.

2.2. Лазер излучил в импульсе длительностью $\tau = 0,13$ мс пучок света с энергией $E = 10$ Дж. Найти среднее давление такого светового импульса, если его сфокусировать в пятнышко диаметром $d = 10$ мкм на поверхность, перпендикулярную к пучку, с коэффициентом отражения $\rho = 0,50$.

2.3. Определить красную границу фотоэффекта для цинка и максимальную скорость фотоэлектронов, вырываемых с его поверхности электромагнитным излучением с длиной волны 250 нм. Работа выхода из цинка 3,74 эВ.

2.4. При поочередном освещении поверхности некоторого металла светом с длинами волн $\lambda_1 = 0,35$ мкм и $\lambda_2 = 0,54$ мкм обнаружили, что соответствующие максимальные скорости фотоэлектронов отличаются друг от друга в $\eta = 2,0$ раза. Найти работу выхода с поверхности этого металла.

2.5. Показать с помощью законов сохранения, что свободный электрон не может полностью поглотить фотон.

2.6. Фотон с энергией $\hbar\omega = 1,00$ МэВ рассеялся на свободном покоившемся электроне. Найти кинетическую энергию электрона отдачи, если в результате рассеяния длина волны фотона изменилась на $\eta = 25$ %.

2.7. Фотон с энергией $\hbar\omega = 250$ кэВ рассеялся под углом $\theta = 120^\circ$ на первоначально покоившемся свободном электроне. Определить энергию рассеянного фотона.

2.8. Найти длину волны рентгеновского излучения, если максимальная кинетическая энергия комптоновских электронов $T_{\max} = 0,19$ МэВ.

2.9. Две одинаковые нерелятивистские частицы движутся перпендикулярно друг к другу с дебройлевскими длинами волн λ_1 и λ_2 . Найти дебройлевскую длину волны каждой частицы в системе их центра масс.

2.10. Вычислить наиболее вероятную дебройлевскую длину волны молекул водорода, находящихся в термодинамическом равновесии при комнатной температуре.

2.11. Параллельный поток моноэнергетических электронов падает нормально на диафрагму с узкой прямоугольной щелью ширины $b = 1,0$ мкм. Определить скорость этих электронов, если на экране, отстоящем от щели на расстояние $l = 50$ см, ширина центрального дифракционного максимума $\Delta x = 0,36$ мм.

2.12. Свободный электрон в момент $t = 0$ локализован в области $\Delta x_0 = 0,10$ нм. Оценить ширину области локализации этого электрона спустя $t = 1$ с.

2.13. Электрон с кинетической энергией $T \approx 4$ эВ локализован в области размером $l = 1$ мкм. Оценить с помощью соотношения неопределенностей относительную неопределенность его скорости.

2.14. След пучка электронов на экране электронно-лучевой трубки имеет диаметр $d \approx 0,5$ мм. Расстояние от электронной пушки до экрана $l \approx 20$ см, ускоряющее напряжение $U = 10$ кВ. Оценить неопределенность координаты электрона на экране.

2.15. Частица массы m движется в одномерном потенциальном поле $U = \kappa x^2/2$ (гармонический осциллятор). Оценить с помощью соотношения неопределенностей минимально возможную энергию частицы в таком поле.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

§ 7. Операторы физических величин и средние значения

Для описания движения микрообъектов неприменимо классическое понятие траектории движения. Состояние частиц определяется волновыми функциями (ψ -функциями). Движению свободной частицы соответствует плоская волна де Бройля. Если частица находится в силовом поле, для описания ее состояний требуются другие волновые функции.

Квадрат модуля волновой функции частицы $|\psi(\mathbf{r})|^2$ равен плотности вероятности обнаружить частицу в точке пространства, положение которой задано радиус-вектором $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Волновая функция описывает распределение частицы по координатам. Так, если $\psi(r, t) = \psi_0 e^{-i(Et - pr)/\hbar}$ (плоская волна де Бройля), то квадрат модуля $|\psi(\mathbf{r})|^2 = |\psi_0|^2 = \text{const}$, и вероятность обнаружить частицу в любой точке одинакова.

Волновую функцию частицы, локализованной в некоторой ограниченной области пространства, можно представить как суперпозицию плоских волн де Бройля $\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k) e^{ikx} dk$ (случай одномер-

ного движения). Квадрат модуля амплитуды составляющих плоских волн $|f(k)|^2$ равен плотности вероятности получить значение $p = \hbar k$ при измерении импульса частицы. Таким образом, функция $|f(k)|^2 = |f(p/\hbar)|^2$ описывает распределение частицы по импульсам.

Волновая функция содержит в себе информацию и о других физических свойствах частицы — энергии, моменте импульса, его проекциях на координатные оси и т. д.

В квантовой физике изучение поведения физической системы подразумевает решение двух задач: а) нахождение волновой функции; б) определение физических характеристик системы (энергии, импульса, момента и т. д.) по известной волновой функции. Для решения второй задачи используются так называемые операторы физических величин.

В математике *оператором* называется правило, с помощью которого одной функции ставится в соответствие другая функция.

Пример. Оператор градиента ставит в соответствие скалярной функции координат $U(x, y, z)$ векторную функцию координат $\text{grad } U = \left(\frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial z} \mathbf{k} \right)$, где $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ — орты координатных осей.

Оператор физической величины f (любого физического параметра, характеризующего частицу) — это такой математический оператор, который позволяет по ψ -функции частицы найти среднее значение физической величины $\langle f \rangle$.

Применяется следующее квантовомеханическое *правило нахождения операторов*: формулы, связывающие между собой физические величины в классической физике, в квантовой физике справедливы для операторов этих величин.

Пример. Если в классической механике кинетическая энергия частицы $E_{\text{кин}}$ связана с ее импульсом p формулой $E_{\text{кин}} = p^2/(2m)$, то оператор кинетической энергии $\hat{E}_{\text{кин}}$ связан с оператором импульса \hat{p} такой же формулой: $\hat{E}_{\text{кин}} = \hat{p}^2/(2m)$. Здесь и везде ниже операторы обозначаются буквой со шляпкой \wedge .

Правило нахождения среднего значения. Пусть частица движется вдоль координатной оси x (одномерное движение), $\psi(x)$ — ее волновая функция, \hat{f} — оператор некоторой физической величины f . Среднее значение физической величины f , обозначаемое как $\langle f \rangle$, вычисляется по формуле:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{f} \psi(x) dx, \quad (7.1)$$

где $\psi^*(x)$ — функция, комплексно сопряженная с $\psi(x)$.

Оператор координаты. Пусть состояние частицы описывается волновой функцией $\psi(x)$, $|\psi(x)|^2$ — плотность вероятности обнаружить частицу в точке с координатой x , $|\psi(x)|^2 dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$ — вероятность обнаружить частицу в интервале от x до $x + dx$. Для вычисления среднего значения координаты необходимо умножить x на вероятность этого значения, равную $|\psi(x)|^2 dx$, и проинтегрировать полученное выражение по всем x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (7.2)$$

Сравнивая (7.1) с (7.2), найдем *оператор координаты* \hat{x} :

$$\hat{x} = x. \quad (7.3)$$

Пример. Вычислим с помощью оператора (7.3) среднее значение координаты x свободной частицы, движущейся вдоль оси x . Волновая

функция такой частицы — плоская волна де Бройля:

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{-i(Et - px)/\hbar}.$$

Определим амплитуду ψ_0 из условия нормировки ψ -функции:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (7.4)$$

(вероятность обнаружить частицу где бы то ни было равна единице).

Представим себе, что частица может находиться в любой точке интервала $-A < x < A$, причем число A настолько велико, что наличие ограничений не сказывается на свободе движения. В этих условиях волновая функция имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_0 e^{-i(Et - px)/\hbar} & \text{при } -A < x < A, \\ 0 & \text{при } x < -A \text{ и } x > A. \end{cases} \quad (7.5)$$

Из (7.4) получим

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx &= \int_{-A}^{+A} \psi_0^2 dx = 2A\psi_0^2 = 1, \\ \psi_0 &= \frac{1}{\sqrt{2A}}. \end{aligned}$$

Согласно (7.1) среднее значение координаты равно

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \\ &= \int_{-A}^{+A} \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i(Et - px)/\hbar} x \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{-i(Et - px)/\hbar} dx = \frac{1}{2A} \int_{-A}^{+A} x dx = 0. \end{aligned}$$

Поскольку вероятность обнаружить частицу, описываемую плоской волной де Бройля, в любой точке пространства одинакова, среднее значение координаты x равно нулю.

Оператор импульса. Оператор проекции импульса на координатную ось x приведем без вывода:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (7.6)$$

Операторы проекций импульса на оси y и z записываются аналогично.

Векторный оператор импульса \mathbf{p} имеет вид

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} - i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} - i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k}, \quad (7.7)$$

где \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} — орты координатных осей.

Пример. Снова рассмотрим свободную частицу, движущуюся вдоль оси x . Ее волновая функция — плоская волна де Бройля (7.5). Импульс \mathbf{p} частицы остается неизменным во времени ($\mathbf{p} = \text{const}$). Поэтому среднее значение проекции импульса на ось x должно быть равно модулю импульса p . Проверим это с помощью оператора (7.6):

$$\begin{aligned}\langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p}_x \psi(x) dx = \\ &= \int_{-A}^{+A} \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i(Et - px)/\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{-i(Et - px)/\hbar} dx = \\ &= \frac{1}{2A} \int_{-A}^{+A} p dx = \frac{p}{2A} \int_{-A}^{+A} dx = \frac{p}{2A} \cdot 2A = p.\end{aligned}$$

Оператор потенциальной энергии частицы. Оператор физической величины, которая является функцией координаты x , представляет собой умножение на эту функцию. В частности, *оператор потенциальной энергии* $U(x)$ равен

$$\hat{U}(x) = U(x). \quad (7.8)$$

В трехмерном случае

$$\hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z). \quad (7.9)$$

Для определения среднего значения потенциальной энергии $U(x)$ необходимо вычислить интеграл

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) U(x) \psi(x) dx.$$

Оператор кинетической энергии. Связь кинетической энергии T с импульсом \mathbf{p} частицы в классической физике имеет вид

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}.$$

С помощью этого соотношения найдем *оператор кинетической энергии* \hat{T} , воспользовавшись оператором импульса (7.8):

$$\begin{aligned}\hat{T} &= \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} - i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} - i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k} \right)^2 = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).\end{aligned}$$

Оператор кинетической энергии можно представить в компактной форме с помощью оператора Лапласа Δ :

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \quad (7.10)$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

В случае одномерного движения частицы вдоль оси x оператор кинетической энергии имеет вид

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (7.11)$$

Пример. Среднее значение кинетической энергии свободной частицы массы m с импульсом p , движущейся в вдоль оси x , равно

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{T} \psi(x) dx = \\ &= \int_{-A}^{+A} \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} dx = \\ &= \frac{1}{2A} \int_{-A}^{+A} \frac{p^2}{2m} dx = \frac{1}{2A} \frac{p^2}{2m} \cdot 2A = \frac{p^2}{2m}. \end{aligned}$$

Поскольку импульс p и энергия E свободной частицы имеют фиксированные значения, средняя кинетическая энергии $\langle T \rangle$ равна $p^2/(2m)$.

Оператор полной механической энергии частицы. В классической физике полная энергия E , кинетическая энергия T и потенциальная энергия U частицы связаны соотношением:

$$E = T + U. \quad (7.12)$$

В квантовой физике аналогичная связь должна существовать между операторами соответствующих величин. Оператор полной механической энергии принято обозначать через \hat{H} . С учетом (7.9) и (7.10) оператор полной механической энергии \hat{H} равен

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z). \quad (7.13)$$

В случае одномерного движения частицы вдоль оси x оператор полной механической энергии имеет вид

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x). \quad (7.14)$$

Среднее значение полной механической энергии частицы равно

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) (\hat{T} + \hat{U}) \psi(x) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{T} \psi(x) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{U} \psi(x) dx = \langle T \rangle + \langle U \rangle.\end{aligned}$$

Окончательно имеем

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle. \quad (7.15)$$

Равенство (7.15) означает: среднее значение полной механической энергии частицы равно сумме средних кинетической и потенциальной энергии.

В квантовой физике невозможно проверить справедливость равенства (7.12) для мгновенных значений полной E , кинетической T и потенциальной U энергии. Выполнение этого равенства означало бы, что одновременно точно измерены координаты x, y, z частицы, которые входят в $U(x, y, z)$, и точное значение импульса p частицы, от которого зависит кинетическая энергия $T = p^2/2m$. В соответствии с принципом неопределенности одновременное точное измерение координат и импульса частицы невозможно.

В классической физике из (7.12) следуют ограничения на возможные значения координат частицы в поле консервативных сил: частица может находиться только в тех областях пространства, где ее полная механическая энергия E больше или равна потенциальной U (см. в кн. 1 «Механика» § 30):

$$E \geq U(x, y, z). \quad (7.16)$$

Поскольку в квантовой физике проверка справедливости соотношения (7.12) невозможна, отсутствует и ограничение (7.16). Это обстоятельство имеет принципиальное значение для объяснения «туннельного эффекта» (см. § 11).

Оператор момента импульса. Найдем оператор момента импульса. Будем исходить из определения момента импульса \mathbf{M} классической механики:

$$\mathbf{M} = [\mathbf{r}\mathbf{p}] = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}.$$

Такая же связь должна существовать между соответствующими операторами в квантовой физике: $\widehat{\mathbf{M}} = [\widehat{\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}}] = [\mathbf{r}\widehat{\mathbf{p}}]$. Выпишем оператор M_z проекции момента импульса на ось z :

$$M_z = x\widehat{p}_y - yp_x = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) - y\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \quad (7.17)$$

Перейдем к сферическим координатам r, θ, φ , связанным с декартовыми координатами x, y, z соотношениями (рис. 17):

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta. \quad (7.18)$$

С помощью (7.18) выразим частную производную по φ через производные по декартовым координатам:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} &= \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z} = \\ &= -r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y} = \\ &= -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y}. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Сравнивая (7.17) и (7.19), найдем оператор проекции момента импульса частицы на ось z :

$$\widehat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (7.20)$$

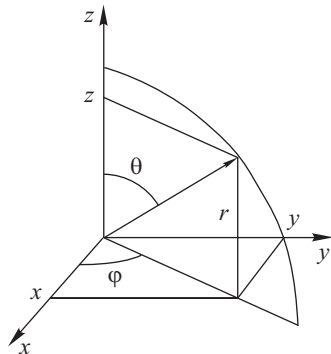


Рис. 17

Момент импульса является одной из важнейших характеристик движения частицы. Он сохраняется при движении в центральном поле, которое нередко встречается в атомных системах. Так, в атоме водорода единственный электрон движется в центральном кулоновском поле атомного ядра.

§ 8. Собственные состояния. Уравнение Шредингера

Функция распределения. Пусть f — некоторая физическая величина, характеризующая свойства частицы (координата, импульс, энергия и т. д.). При выполнении серии измерений величины f будут получены, вообще говоря, различные значения f_1, f_2, \dots в зависимости от того, в каком состоянии находилась система в момент измерения. В таком случае физическую величину f называют *случайной величиной*.

Обозначим через n число измерений величины f , $dn(f)$ — число опытов, в которых значение измеряемой величины находилось в пределах от f до $f + df$. *Функцией распределения* состояний системы по значениям случайной величины f или *плотностью вероятности* случайной величины f называется функция, равная

$$P(f) = \frac{dn(f)}{ndf}. \quad (8.1)$$

Приведем примеры.

1. Пусть $f = V$ — модуль скорости молекулы идеального газа. Функция распределения молекул по скоростям (распределение Максвелла) имеет вид

$$F(V) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-mV^2/2kT} \cdot 4\pi V^2.$$

Примерный график этой функции представлен на рис. 18.

2. Если $f = V_x$ — проекция на координатную ось x вектора скорости молекулы, то функция распределения молекул идеального газа по проекциям скорости V_x (распределение Максвелла) имеет вид

$$\varphi(V_x) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} e^{-mV_x^2/2kT}.$$

График этой функции представлен на рис. 19.

3. Квадрат модуля ψ -функции равен плотности вероятности обнаружить частицу в той или иной точке пространства. Иначе говоря, $|\psi(x)|^2$ — это функция распределения частицы по координате x . В случае плоской волны де Бройля $\psi(x, t) = \psi_0 e^{-i(Et - px)/\hbar}$ рассматриваемая функция распределения частицы по координате — константа: $|\psi(x)|^2 = |\psi_0|^2 = \text{const}$ (рис. 20).

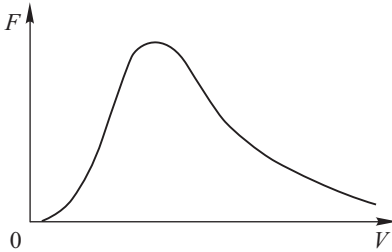


Рис. 18

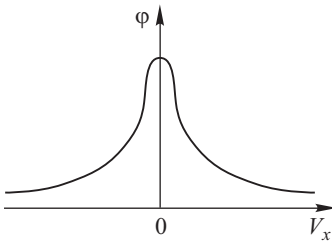


Рис. 19

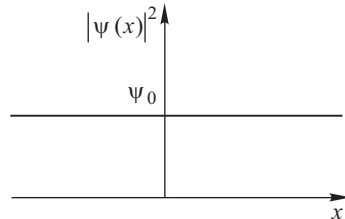


Рис. 20

Среднее значение случайной величины. Если известна плотность вероятности $P(f)$, можно вычислить среднее значение $\langle f \rangle$ случайной величины f по формуле:

$$\langle f \rangle = \int f P(f) df, \quad (8.2)$$

где интегрирование ведется по всей области возможных значений f .

Приведем доказательство формулы (8.2). Пусть n — полное число измерений, в каждом из которых величина f принимала, вообще говоря, различные значения. Всю область возможных значений величины f разобьем на множество интервалов одинаковой ширины Δf

с началом в точках f_1, f_2, \dots и т. д. Ширина Δf достаточно мала. Обозначим через $\Delta n_1, \Delta n_2, \dots$ число опытов, в которых полученные при измерении значения f находились в пределах интервалов $(f_1; f_1 + \Delta f), (f_2; f_2 + \Delta f), \dots$ соответственно. Среднее арифметическое f с учетом определения функции распределения (8.1) равно

$$\langle f \rangle = \frac{f_1 \Delta n_1 + f_2 \Delta n_2 + \dots}{n} \approx \frac{\int f dn}{n} = \int f \frac{dn}{n} = \int f \frac{dn}{n df} df = \int f P(f) df.$$

Здесь строгий переход от суммирования к интегрированию возможен, если число интервалов, на которые разбита область возможных значений f , велико и в пределе стремится к бесконечности. Интегрирование ведется по всей области возможных значений f . Таким образом, формула (8.2) доказана.

Дисперсия случайной величины и ее свойства. Определим параметр, который характеризует «ширину» функции распределения, то есть позволяет судить, насколько сильно получаемое в опыте значение f в среднем отклоняется от истинного значения этой физической величины. В качестве истинного будем принимать $\langle f \rangle$.

Отклонение полученного в опыте значения f случайной величины от ее среднего $\langle f \rangle$ обозначим через Δf :

$$\Delta f = f - \langle f \rangle. \quad (8.3)$$

При любой функции распределения $P(f)$ среднее отклонение Δf равно нулю:

$$\langle \Delta f \rangle = 0. \quad (8.4)$$

Это утверждение доказывает следующая цепочка равенств:

$$\langle \Delta f \rangle = \langle f - \langle f \rangle \rangle = \langle f \rangle - \langle \langle f \rangle \rangle = \langle f \rangle - \langle f \rangle = 0.$$

Здесь воспользовались тем, что среднее значение суммы или разности случайных величин равно сумме или разности их средних значений, что следует из формулы (8.2) для среднего.

Поскольку равенство (8.4) имеет место при любой функции распределения $P(f)$, $\langle \Delta f \rangle$ не может служить характеристикой функции распределения $P(f)$.

Дисперсией случайной величины f , обозначаемой символом $D(f)$, будем называть средний квадрат отклонения f от среднего (см. (8.2)):

$$D(f) = \langle (\Delta f)^2 \rangle = \int (\Delta f)^2 P(f) df, \quad (8.5)$$

где интеграл вычисляется по всей области возможных значений f .

Чем больше дисперсия $D(f)$, тем более «широким» является распределение $P(f)$.

Свойства дисперсии.

1. Дисперсия неотрицательна:

$$D(f) \geq 0. \quad (8.6)$$

Доказательство. По определению (8.5) дисперсия — это среднее значение неотрицательной величины $(\Delta f)^2$, и поэтому сама неотрицательна.

2. Если дисперсия случайной величины f равна нулю, то f имеет определенное (фиксированное) значение. Это значение будет получено в любом опыте по измерению f .

Доказательство. Представим интеграл (8.5) в виде суммы бесконечного числа неотрицательных слагаемых:

$$D(f) = \int (\Delta f)^2 P(f) df \approx \sum_i (f_i - \langle f \rangle)^2 P(f_i) = 0,$$

где f_i — значение f , полученное в некотором опыте с номером i . Из равенства нулю суммы неотрицательных слагаемых следует, что каждое слагаемое равно нулю:

$$(f_i - \langle f \rangle)^2 = 0.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} f_i - \langle f \rangle &= 0, \\ f_i &= \langle f \rangle. \end{aligned}$$

Последнее равенство означает, что все измеряемые в опыте значения f_i одинаковы и равны $\langle f \rangle$.

3. Дисперсию случайной величины f можно представить в виде разности ее среднего квадрата и квадрата среднего:

$$D(f) = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2. \quad (8.7)$$

Доказательство. Учтем линейность операции вычисления среднего (8.2), а также то обстоятельство, что среднее значение постоянной величины (например, среднее значение $\langle f \rangle$ или $\langle f \rangle^2$), равно этой величине. Тогда из (8.5) получим

$$\begin{aligned} D(f) &= \langle (\Delta f)^2 \rangle = \langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle = \langle f^2 - 2f\langle f \rangle + \langle f \rangle^2 \rangle = \\ &= \langle f^2 \rangle - \langle 2f\langle f \rangle \rangle + \langle \langle f \rangle^2 \rangle = \langle f^2 \rangle - 2\langle f \rangle \langle f \rangle + \langle f \rangle^2 = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

4. Если среднее значение квадрата случайной величины $\langle f^2 \rangle$ равно квадрату ее среднего $\langle f \rangle^2$, то величина имеет определенное (фиксированное) значение.

Это свойство является следствием свойств 3 и 2.

Собственные функции и собственные состояния. Собственной функцией оператора физической величины \hat{f} называется функция $\psi(x, y, z)$, которая является решением уравнения:

$$\hat{f}\psi = f_0\psi, \quad (8.8)$$

где f_0 — некоторое число. В квантовой физике на собственные функции накладываются следующие ограничения: а) конечность; б) однозначность; в) непрерывность; г) гладкость (функция должна иметь непрерывную первую производную). Набор ограничений обуславливается тем, что рассматриваемые функции описывают поведение реальных физических систем.

Собственными значениями физической величины f называются числа f_0 , для которых решения уравнения (8.8) существуют.

Собственным состоянием физической величины f называется такое состояние частицы (физической системы), в котором f имеет определенное (фиксированное) значение.

Если, например, величина f — это импульс p частицы, то движение свободной частицы в пространстве в отсутствие силовых полей является собственным состоянием импульса, поскольку в этом случае p сохраняется (имеет фиксированное значение).

Докажем следующее утверждение. Собственная функция оператора физической величины f является волновой функцией собственного состояния этой величины. Иными словами, если ψ -функция некоторого состояния частицы является решением уравнения $\hat{f}\psi = f_0\psi$ (8.8), данное состояние является собственным для физической величины f , то есть в указанном состоянии f имеет определенное фиксированное значение, причем $f = f_0$.

Доказательство. Пусть функция $\psi(x)$ — собственная функция оператора f , то есть справедливо равенство (8.8):

$$\hat{f}\psi = f_0\psi.$$

Воспользуемся этим равенством при вычислении дисперсии f (см. также (7.1)):

$$\begin{aligned} D(f) &= \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 = \\ &= \int \psi^* (\hat{f}^2) \psi dx - \left(\int \psi^* \hat{f} \psi dx \right)^2 = \int \psi^* \hat{f} \hat{f} \psi dx - \left(\int \psi^* \hat{f} \psi dx \right)^2 = \\ &= \int \psi^* \hat{f} f_0 \psi dx - \left(\int \psi^* f_0 \psi dx \right)^2 = f_0 \int \psi^* \hat{f} \psi dx - \left(f_0 \int \psi^* \psi dx \right)^2 = \\ &= f_0 \int \psi^* f_0 \psi dx - (f_0)^2 = f_0^2 \int \psi^* \psi dx - f_0^2 = f_0^2 - f_0^2 = 0. \end{aligned}$$

В процессе преобразований ψ -функцию считали нормированной: $\int \psi^* \psi dx = 1$.

Таким образом, показано, что дисперсия f в состоянии, описываемом собственной функцией оператора f , равна нулю. Следовательно, f имеет в этом состоянии определенное (фиксированное) значение. Оно равно $\langle f \rangle$ (среднее значение константы равно этой константе), а также

собственному значению f_0 оператора \hat{f} :

$$f = \langle f \rangle = \int \psi^* \hat{f} \psi dx = \int \psi^* f_0 \psi dx = f_0 \int \psi^* \psi dx = f_0,$$

что и требовалось доказать.

Следствие доказанного утверждения. Для того чтобы найти волновую функцию ψ собственного состояния физической величины \hat{f} и ее собственные значения f_0 , необходимо решить уравнение (8.8): $\hat{f}\psi = f_0\psi$.

Пример. В случае одномерного движения вдоль оси x найдем собственную функцию $\psi(x)$ оператора импульса $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{d}{dx}$, то есть решим уравнение

$$\begin{aligned}\hat{p}\psi &= p_0\psi, \\ -i\hbar \frac{d\psi}{dx} &= p_0\psi.\end{aligned}$$

После интегрирования получим

$$\psi = ae^{ip_0x/\hbar},$$

где a — независимая от x величина (постоянная интегрирования). Найденная ψ -функция — это пространственная часть уравнения волны де Бройля, она описывает состояние свободной частицы с фиксированным значением импульса $p = p_0$. (Временная зависимость ψ -функции входит в коэффициент a : $a = \psi_0 e^{-iEt/\hbar}$, где E — энергия частицы).

Уравнение Шредингера. Стационарным состоянием называется собственное состояние энергии частицы (физической системы).

В стационарном состоянии энергия имеет определенное (фиксированное) значение. Волновая функция ψ стационарного состояния — это собственная функция оператора полной энергии $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$ (см. (7.13) и (7.14)). Она является решением уравнения: $\hat{H}\psi = E_0\psi$, где E_0 — собственное значение энергии.

Уравнением Шредингера (1887–1961) для стационарных состояний частицы (физической системы) называется уравнение

$$\hat{H}\psi = E_0\psi, \quad (8.9)$$

или более подробно:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x, y, z) + U(x, y, z)\psi(x, y, z) = E_0\psi(x, y, z). \quad (8.10)$$

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

В случае одномерного движения частицы вдоль оси x уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E_0\psi(x). \quad (8.11)$$

Функции $\psi(x, y, z)$ и $\psi(x)$ в уравнениях (8.10) и (8.11) соответственно — это волновые функции стационарных состояний частицы (физической системы) с энергией E_0 .

Физический смысл уравнения Шредингера (8.9) заключается в том, что оно позволяет найти волновые функции частицы или физической системы в состояниях с определенным (неизменным во времени, фиксированным) значением энергии, и определить эту энергию.

Математический смысл уравнения (8.9) состоит в том, что дисперсия случайной физической величины E , которой является энергия частицы или физической системы, равна нулю:

$$\hat{H}\psi = E_0\psi \Rightarrow D(E) = 0, \quad E = E_0 = \text{const.}$$

Уравнение (8.9), называемое *стационарным уравнением Шредингера*, является частным случаем уравнения, описывающего динамику поведения физических систем во времени, которое имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, y, z, t). \quad (8.12)$$

Временное уравнение Шредингера (8.12) в данном курсе подробно не рассматривается.

Задачи

3.1. Проверить следующие операторные равенства для произвольной функции $\psi(x)$: а) $\frac{d}{dx}x = 1 + x\frac{d}{dx}$; б) $\left(1 + \frac{d}{dx}\right)^2 = 1 + 2\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}$.

3.2. Найти результат применения оператора $\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)x^2$ к функции $\cos x$.

3.3. Найти результат применения оператора $\left(\frac{d^2}{dx^2}\right)x^2$ к функции e^x .

3.4. В момент $t = 0$ волновая функция некоторой частицы имеет вид $\psi = Ae^{-x^2/4\sigma^2 + ikx}$. Изобразить примерный вид зависимостей: а) действительной части ψ от x ; б) $|\psi|^2$ от x .

3.5. Частица находится в сферически-симметричном потенциальном поле в стационарном состоянии $\psi = e^{-r/a}/(r\sqrt{2\pi a})$, где A и α — неизвестные постоянные. Найти $\langle r \rangle$.

3.6. Частица массы m находится в одномерном потенциальном поле $U(x) = \kappa x^2$, где κ — положительная постоянная. Найти $\langle U \rangle$ частицы в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi = Ae^{-\alpha x^2}$, где A и α — неизвестные постоянные.

3.7. Частица в момент $t = 0$ находится в состоянии $\psi = Ae^{-x^2/\alpha^2 + ikx}$, где A и α — некоторые постоянные. Найти: а) $\langle x \rangle$; б) $\langle p_x \rangle$ — среднее значение проекции импульса.

КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ

Рассмотрим несколько примеров использования уравнения Шредингера для определения собственных функций и собственных значений энергии частицы.

§ 9. Частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками

Пусть частица массой m движется вдоль оси x . Зависимость ее потенциальной энергии от координаты x имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \text{ и } x > a, \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a. \end{cases} \quad (9.1)$$

На рис. 21 показан график функции $U(x)$. Доступная для движения область пространства соответствует значениям координаты $0 \leq x \leq a$, при этом потенциальная энергия частицы равна нулю; в точках с координатами $x < 0$ и $x > a$ частица находиться не может. Если потенциальная энергия имеет вид (9.1), принято говорить, что частица находится в одномерной *потенциальной яме с бесконечно высокими стенками*.

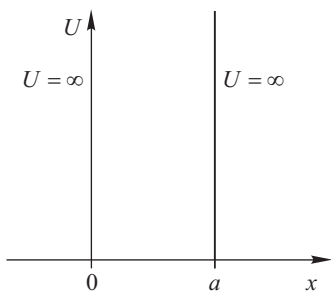


Рис. 21

Реальной физической системой, которую можно рассматривать как трехмерную потенциальную яму с бесконечно высокими стенками, является, например, кристаллический проводник в форме прямоугольного параллелепипеда с длиной ребер a , b и c . Для того чтобы электрон проводимости мог выйти во внешнюю среду, ему необходимо сооб-

общить энергию, равную работе выхода из металла. Если работа выхода велика по сравнению со средней энергией теплового движения электронов, самопроизвольный выход частиц из потенциальной ямы практически невозможен.

Найдем с помощью уравнения Шредингера собственные функции и собственные значения энергии частицы в одномерной потенциальной яме, определяемой выражением (9.1).

Поскольку за пределами ямы частица находиться не может, $\psi(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > a$. Внутри ямы ($0 \leq x \leq a$) уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ имеет вид

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) &= E\psi(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + 0 \cdot \psi(x) &= E\psi(x), \\ \psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) &= 0, \\ \psi''(x) + k^2\psi(x) &= 0. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Здесь E — собственное значение энергии частицы (нижний индекс «нуль», который выше применялся для обозначения собственных значений энергии (см. (8.9)), будем опускать); $\psi''(x)$ — вторая производная волновой функции по координате, $k^2 = 2mE/\hbar^2$ — зависящий от энергии E коэффициент.

Общее решение уравнения (9.2) имеет вид

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha),$$

где A и α — постоянные, которые подлежат определению.

В силу непрерывности волновой функции ее значения на концах отрезка $0 \leq x \leq a$ должны быть равны значениям $\psi(x)$ при $x < 0$ и $x > 0$, то есть нулю. При $x = 0$ имеем

$$\psi(0) = A \sin \alpha = 0.$$

Отсюда:

$$\alpha = 0. \quad (9.3)$$

Условие непрерывности волновой функции для правого края ямы, когда $x = a$, имеет вид

$$\psi(a) = A \sin ka = 0.$$

Отсюда:

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9.4)$$

Значение $n = 0$ не представляет интереса, так как в этом случае волновая функция равна нулю, что означает отсутствие частицы в яме. При замене $n = 1, 2, 3, \dots$ на $n = -1, -2, -3, \dots$ волновая функция $\psi(x) = A \sin kx$, соответственно, меняет знак на противоположный. При этом квадрат ее модуля $|\psi(x)|^2$ не меняется. Поскольку физическим смыслом обладает именно величина $|\psi(x)|^2$, а не сама функция $\psi(x)$, изменение знака волновой функции не приводит к возникновению нового состояния частицы в яме. Таким образом, чтобы получить волновые функции всех возможных состояний частицы, достаточно в выражении (9.4) придать числу n только целые положительные значения.

С учетом (9.3) и (9.4) общее решение уравнения (9.2) принимает следующий вид

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (9.5)$$

Постоянную A определяем из условия нормировки ψ -функции. Вероятность обнаружить частицу где бы то ни было внутри ямы ($0 \leq x \leq a$) равна единице:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx &= 1, \\ \frac{1}{2} A^2 \int_0^a \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}\right) dx &= 1, \\ \frac{1}{2} A^2 a &= 1, \\ A &= \sqrt{\frac{2}{a}}. \end{aligned}$$

Окончательно нормированные волновые функции частицы в потенциальной яме (9.1) — собственные функции оператора полной энергии — имеют вид

$$\psi(x) = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} A \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (9.6)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ Индекс n у символа ψ -функции означает ее зависимость от целочисленного параметра n .

На рис. 22 показаны графики функций $\psi_n(x)$ при значениях $n = 1$ и $n = 2$.

Определим возможные значения энергии частицы в яме. Для этого возведем в квадрат обе части равенства (9.4) и выразим энергию E в зависимости от целого числа n :

$$\begin{aligned} k^2 a^2 &= n^2 \pi^2, \\ \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 &= n^2 \pi^2, \\ E = E_n &= \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \end{aligned} \quad (9.7)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

Полученное выражение (9.7) определяет возможные значения энергии частицы в яме с бесконечно высокими стенками — собственные

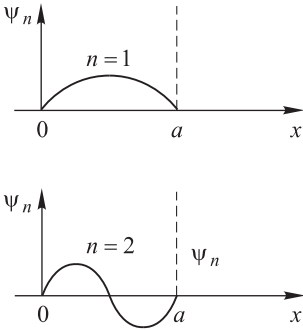


Рис. 22

значения энергии. Набор собственных значений называют *энергетическим спектром* частицы. Таким образом, полная энергия E частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (9.7) может принимать лишь дискретные значения. Иначе говоря, ее энергетический спектр является дискретным. С ростом n расстояния между уровнями энергии увеличиваются (рис. 23).

Целое число n , от которого зависят как вид волновой функции $\psi_n(x)$, так и значение энергии частицы E_n (см. (9.6), (9.7)), называется *квантовым числом*.

Подведем итоги.

1. Найдены волновые функции (9.6) и собственные значения энергии (9.7) стационарных состояний частицы в яме.

2. Энергетический спектр частицы является дискретным. При этом принято говорить, что энергия квантуется.

3. Значения энергии и вид волновой функции зависят от целочисленного параметра n , называемого квантовым числом.

4. Существование дискретного энергетического спектра и появление квантового числа n , определяющего вид волновых функций и значения энергии частицы, являются следствием налагаемых на волновую функцию условий. В рассматриваемом примере — это условие непрерывности волновой функции на краях потенциальной ямы.

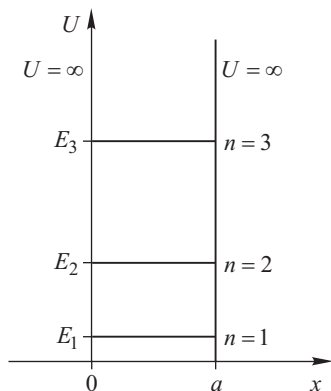


Рис. 23

§ 10. Частица в потенциальной яме со стенками конечной высоты

Рассмотрим одномерную задачу, в которой частица массой m может двигаться только вдоль координатной оси x . Потенциальная энергия $U(x)$ частицы имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ U = \text{const} & \text{при } x > a. \end{cases} \quad (10.1)$$

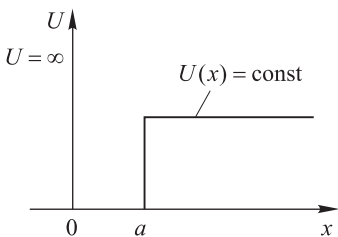


Рис. 24

В рассматриваемом случае потенциальная яма — это область пространства, определяемая условием $0 \leq x \leq a$. Левая стенка ямы ($x = 0$) бесконечно высокая, а высота правой стенки ($x = a$) равна U (рис. 24).

Рассмотрим случай, когда полная механическая E энергия частицы меньше U — высоты правой стенки ямы. В классической физике частица с такой энергией E не может находиться в области пространства $x > a$, так как при этом $E < U$, то есть полная энергия меньше потенциальной. Покажем, что в квантовой физике пребывание частицы в указанной области возможно.

Стационарное уравнение Шредингера для рассматриваемой одномерной задачи имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (10.2)$$

Волновые функции. С помощью уравнения (10.2) определим вид волновой функции частицы в силовом поле $U(x)$ (10.1). В области $x < 0$ частица находиться не может, поэтому здесь $\psi(x) = 0$.

Обозначим решения уравнения Шредингера (10.2) в области 1 $0 \leq x \leq a$ через $\psi_1(x)$, в области 2 $x > a$ через $\psi_2(x)$.

В области 1 $U(x) = 0$, и уравнение (10.2) имеет вид

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} &= E\psi_1, \\ \psi_1''(x) + k_1^2\psi_1(x) &= 0. \end{aligned} \quad (10.3)$$

Здесь ψ_1'' — вторая производная по координате x волновой функции $\psi_1(x)$ и введено обозначение $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$.

Общее решение уравнения (10.3):

$$\psi_1(x) = A \sin(kx + \alpha),$$

где A и α — постоянные.

Как указано выше, $\psi(x) = 0$ при $x < 0$. В силу непрерывности волновая функция $\psi_1(x)$ в точке $x = 0$ также должна быть равна нулю:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= 0, \\ A \sin \alpha &= 0. \end{aligned}$$

Отсюда определяем α :

$$\alpha = 0.$$

С учетом этого волновая функция $\psi_1(x)$ имеет вид

$$\psi_1(x) = A \sin kx. \quad (10.4)$$

Запишем уравнение Шредингера для области 2 $x > a$, где потенциальная энергия U постоянна:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + U\psi_2 &= E\psi_2, \\ \psi_2''(x) - k_2^2\psi_2(x) &= 0. \end{aligned} \quad (10.5)$$

Здесь ψ_2'' — вторая производная по координате x волновой функции $\psi_2(x)$ и введено обозначение $k_2^2 = 2m(U - E)/\hbar^2$. Так как $U > E$, дробь $2m(U - E)/\hbar^2 = k_2^2$ положительна.

Общее решение уравнения (10.5):

$$\psi_2(x) = Be^{k_2x} + Ce^{-k_2x}, \quad (10.6)$$

где B и C — некоторые постоянные. Пусть для определенности $k_2 > 0$. Волновая функция $\psi_2(x)$ должна быть ограниченной. При $x > a$ для этого необходимо потребовать:

$$B = 0.$$

В противном случае $\psi_2(x)$ неограниченно возрастала бы при увеличении x .

Таким образом, волновая функция частицы в области $x > a$, имеет вид

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}. \quad (10.7)$$

Полученные результаты объединим формулой:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ A \sin kx & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ Ce^{-k_2x} & \text{при } x > a. \end{cases}$$

Существование отличного от нуля решения уравнения Шредингера при $x > a$ доказывает возможность проникновения частицы в такие области пространства, где ее потенциальная энергия больше полной $U > E$.

Квантование энергии. Определим энергетический спектр частицы в рассматриваемой потенциальной яме. Волновая функция и ее первая производная должны быть непрерывными в точке $x = a$. Это означает выполнение условий:

$$\begin{aligned} \psi_1(a) &= \psi_2(a), \\ \psi_1'(a) &= \psi_2'(a). \end{aligned}$$

Воспользовавшись выражениями для ψ_1 и ψ_2 (10.4) и (10.7), получим:

$$\begin{aligned} A \sin k_1 a &= Ce^{-k_2 a}, \\ Ak_1 \cos k_1 a &= -k_2 Ce^{-k_2 a}. \end{aligned}$$

Поделив уравнения почленно друг на друга и подставив выражения для k_1 и k_2 , получим:

$$\operatorname{tg} k_1 a = -\frac{k_1}{k_2}, \quad (10.8)$$

$$\operatorname{tg} \left(a \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \right) = -\sqrt{\frac{E}{U - E}}. \quad (10.9)$$

Так как k_1 и k_2 — положительные величины (см. текст после формул (9.4) и (10.6)), правая часть уравнения (10.9) — должна быть отрицательна (отражено знаком минус перед корнем квадратным). Подкоренное выражение в правой части (10.9) положительное, так как по условию задачи $E < U$.

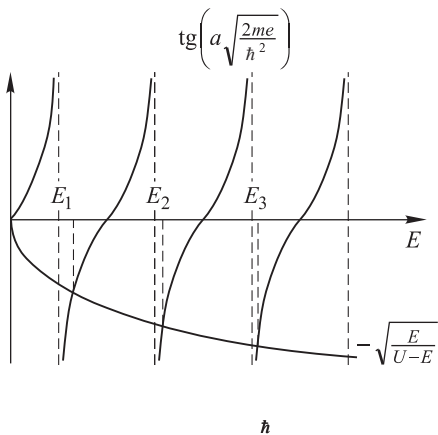


Рис. 25

Выражение (10.9) можно рассматривать как уравнение относительно неизвестной E . Его решения определяют возможные значения энергии E частицы в яме, уровни энергии. Это уравнение не решается аналитически, но в принципе может быть решено графически или численно. На рис. 25 представлены графики правой и левой части уравнения (10.9) как функций переменной E .

Значения E , соответствующие их точкам пересечения, являются решениями (10.9). Из рисунка видно, что существует, вообще говоря, дискретный набор решений (10.9): E_1, E_2, E_3, \dots и, соответственно, дискретный набор уровней энергии частицы в рассматриваемой потенциальной яме со стенками конечной высоты.

Условия существования уровней энергии в яме. Уровни энергии в потенциальной яме со стенками конечной высоты, соответствующие стационарным состояниям частицы, возникают только при условии, если яма является достаточно глубокой и широкой, а именно, если ее высота U и ширина a удовлетворяют неравенству:

$$Ua^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}. \quad (10.10)$$

Докажем неравенство (10.10). Для того чтобы уравнение (10.9) имело решения, значения тангенса в его левой части должны быть отрицательными, при этом аргумент тангенса $k_1 a$ должен превышать $\pi/2$:

$$k_1 a > \frac{\pi}{2}.$$

Подставив сюда $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ и выполнив преобразования, получим

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a &> \frac{\pi}{2}, \\ E &> \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \end{aligned}$$

Поскольку по условию $U > E$, то справедливо неравенство:

$$U > E > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2},$$

что и требовалось доказать.

Реальным примером потенциальной ямы со стенками конечной высоты служит следующий. Опытным путем установлено, что два нейтрона притягиваются друг к другу, и для описания их взаимодействия можно пользоваться моделью потенциальной ямы. Однако глубина ямы недостаточно для возникновения в ней стационарных уровней энергии, соответствующих связанному состоянию двух нейтронов. Атомного ядра, в состав которого входят два нейтрона, в природе не существует.

Сила притяжения между протоном и нейтроном несколько больше, чем между двумя нейтронами, а соответствующая потенциальная яма более глубокая, то есть условие, подобное (10.10), оказывается выполненным. Связанное состояние нейтрона и протона существует, оно называется *дейтроном* и представляет собой ядро атома так называемого тяжелого водорода ${}^2\text{H}$.

§ 11. Туннельный эффект

При решении задачи о частице в потенциальной яме со стенками конечной высоты было показано, что частица может проникать в такие области пространства, где ее потенциальная энергия U превышает полную энергию E . Волновая функция частицы при этом имеет вид (10.7). Это важное свойство частиц, подчиняющихся законам квантовой физики, позволяет объяснить ряд важных физических явлений, в частности, так называемый *туннельный эффект*.

Пусть потенциальная энергия частицы массы m , которая может двигаться только вдоль оси x , описывается функцией U (рис. 26)

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 \leq x \leq a, \\ U = \text{const} & \text{при } a \leq x \leq b, \\ 0 & \text{при } x > b. \end{cases} \quad (11.1)$$

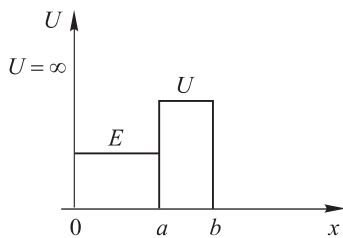


Рис. 26

Полная энергия частицы равна E , при этом $E < U$. Пусть расположенная в области $0 \leq x \leq a$ частица движется в положительном направлении оси x .

Для того чтобы частица с энергией $E < U$ из области $0 \leq x \leq a$ (потенциальная яма) могла попасть в область $x > b$, ей необходимо преодолеть так называемый «потенциальный барьер» — относительно узкую область пространства $a \leq x \leq b$, в которой потенциальная энергия U превышает полную энергию E частицы. В рассматриваемом

примере потенциальный барьер имеет прямоугольную форму. Переход частицы с $E < U$ из области $0 \leq x \leq a$ в область $x > b$ — пример туннельного эффекта.

Туннельный эффект — это проникновение частицы через потенциальный барьер (относительный или локальный максимум потенциальной энергии, рассматриваемой как функция координат), при условии, что энергия частицы меньше высоты барьера.

Волновая функция в области $a \leq x \leq b$ имеет вид (см. (10.6))

$$\psi(x) = Be^{k_2x} + Ce^{-k_2x},$$

где $k_2 = \sqrt{2m(U-E)/\hbar^2}$, B и C — постоянные. По физическому смыслу волновая функция частицы, которая движется в положительном направлении оси x и встречает на своем пути потенциальный барьер, является убывающей функцией координаты, так как вероятность обнаружения частицы с увеличением x уменьшается. Поэтому необходимо положить $B = 0$, и рассматриваемая волновая функция имеет вид убывающей экспоненты:

$$\psi(x) = Ce^{-k_2x}. \quad (11.2)$$

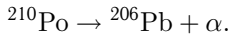
Проницаемостью потенциального барьера D называется отношение плотностей вероятности обнаружения частицы непосредственно за и перед барьером.

В рассматриваемом примере проницаемость барьера рассчитывается с помощью волновой функции (11.2):

$$D = \frac{|\psi(b)|^2}{|\psi(a)|^2} = \left(\frac{Ce^{-k_2b}}{Ce^{-k_2a}} \right)^2 = e^{-2k_2(b-a)} = e^{-2(b-a)\sqrt{2m(U-E)/\hbar^2}}, \quad (11.3)$$

где $(b-a)$ представляет собой ширину, а U — высоту барьера.

Примером туннелирования служит ядерная реакция — α -распад радиоактивных ядер: материнское ядро испускает α -частицу, которая состоит из двух протонов и двух нейтронов, и в результате превращается в дочернее ядро (продукт радиоактивного распада). Так ядро полония Po превращается в ядро свинца:



Экспериментально установлено, что энергия испускаемой α -частицы $E_\alpha = 5,3$ Мэв, а высота потенциального барьера, который необходимо ей преодолеть, чтобы покинуть ядро атома полония, составляет $U = 23$ Мэв. Данный распад возможен только благодаря туннельному эффекту.

Проницаемость барьера произвольной формы. Зависимость потенциальной энергии U от координаты x в области локального максимума $a \leq x \leq b$ может описываться различными функциями, а соответствующий потенциальный барьер иметь произвольную форму (рис. 27). Выражение для проницаемости D в этом случае можно получить,

аппроксимируя барьер набором узких расположенных вплотную друг к другу прямоугольников.

Разобьем весь промежуток $a \leq x \leq b$ на множество интервалов малой ширины Δx_i , где i — порядковый номер, x_i — координата левой границы интервала. В пределе число i стремится к бесконечности, а ширина Δx_i каждого интервала — к нулю. Значения функции $U(x)$ на промежутке от x_i до $x_i + \Delta x_i$ заменим константой $U(x_i)$.

Проницаемость D_i прямоугольного барьера шириной Δx_i и высотой $U(x_i)$ вычисляется по формуле (11.3), а именно:

$$D_i = e^{-2\Delta x_i \sqrt{2m(U(x_i) - E)/\hbar^2}}. \quad (11.4)$$

Величина D_i характеризует вероятность проникновения частицы сквозь барьер с номером i . Вероятность прохождения частицы через несколько последовательных барьеров равна произведению вероятностей прохождения через каждый из них (вероятности независимых событий перемножаются). Следовательно, проницаемость барьера в области $a \leq x \leq b$ равна

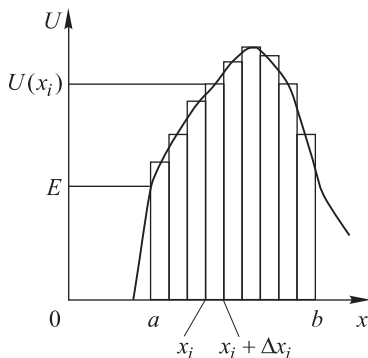


Рис. 27

$$\begin{aligned} D &= D_1 D_2 \dots D_i \dots = e^{-2\Delta x_1 \sqrt{2m(U(x_1) - E)/\hbar^2}} \times \\ &\times e^{-2\Delta x_2 \sqrt{2m(U(x_2) - E)/\hbar^2}} \dots e^{-2\Delta x_i \sqrt{2m(U(x_i) - E)/\hbar^2}} \dots = \\ &= e^{-2 \sum \Delta x_i \sqrt{2m(U(x_i) - E)/\hbar^2}}. \end{aligned}$$

В пределе при стремлении к бесконечности числа интервалов, на которые разбита область $a \leq x \leq b$, суммирование необходимо заменить интегрированием. Проницаемость потенциального барьера произвольной формы равна

$$D = e^{-2 \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)/\hbar^2} dx}. \quad (11.5)$$

§ 12. Гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором в классической физике называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы:

$$F_x = -kx,$$

где x — смещение частицы из положения равновесия, k — коэффициент пропорциональности (например, жесткость пружины), F_x — проекция на направление движения (ось x) действующей на частицу силы.

Потенциальная энергия частицы $U(x)$ описывается функцией:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}. \quad (12.1)$$

Собственная частота классического гармонического осциллятора равна

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (12.2)$$

Полная механическая энергия E осциллятора в отсутствие диссипативных сил сохраняется. Она может принимать любые значения, непрерывно изменяясь в диапазоне от нуля до $+\infty$.

Чтобы найти волновые функции $\psi(x)$ и собственные значения энергии E квантовомеханического гармонического осциллятора, необходимо решить уравнение Шредингера частицы в силовом поле, описываемом функцией (12.1). Уравнение Шредингера имеет вид

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x),$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{kx^2}{2}\psi(x) = E\psi(x).$$

Это уравнение имеет конечные, однозначные, непрерывные и гладкие решения при таких значениях параметра E , которые вычисляются по формуле:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (12.3)$$

Здесь ω совпадает с собственной частотой классического гармонического осциллятора (12.2), $n = 0, 1, 2, \dots$ — квантовое число. Выражение (12.3) определяет возможные значения энергии квантового гармонического осциллятора.

Из (12.3) видно, что набор собственных значений энергии является дискретным. Энергетические уровни

отстоят друг от друга на одинаковом расстоянии $\hbar\omega$ (рис. 28). Согласно (12.3) при $n = 0$ энергия квантового осциллятора не равна нулю.

Нулевой энергией квантового гармонического осциллятора называется наименьшее возможное собственное значение энергии при $n = 0$:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (12.4)$$

Можно показать, что энергия квантовомеханического гармонического осциллятора при его переходе из одного стационарного состояния

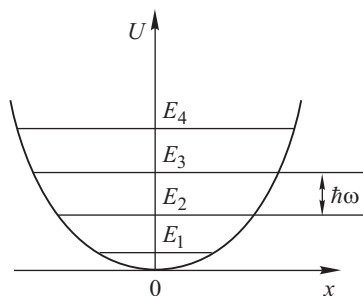


Рис. 28

в другое может изменяться только порциями $\hbar\omega$, то есть возможны лишь переходы между соседними уровнями энергии. При таких переходах квантовое число n изменяется на единицу: $\Delta n = \pm 1$. Это ограничение служит примером так называемых правил отбора для квантовых чисел.

Правилами отбора называются условия, накладываемые на изменения квантовых чисел при переходах системы из одного состояния в другое.

Примерами гармонических осцилляторов служат двухатомные молекулы. Так, в молекуле водорода H_2 параметр ω (собственная частота колебаний) соответствует инфракрасному диапазону электромагнитных волн.

Задачи

4.1. Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Найти ширину ямы, если разность энергии между уровнями с $n_1 = 2$ и $n_2 = 3$ составляет $\Delta E = 0,30$ эВ.

4.2. Частица находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины l с абсолютно непроницаемыми стенками ($0 < x < l$). Найти вероятность пребывания частицы в области $l/3 < x < 2l/3$.

4.3. Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Ширина ямы l такова, что энергетические уровни расположены весьма густо. Найти плотность уровней dN/dE , т.е. их число на единичный интервал энергии, в зависимости от E . Вычислить dN/dE для $E = 1,0$ эВ, если $l = 1,0$ см.

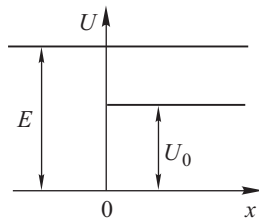
4.4. Частица массы m находится в трехмерной кубической потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Сторона куба равна a . Найти:

- а) собственные значения энергии частицы;
- б) разность энергий 3-го и 4-го уровней;
- в) энергию 6-го уровня и соответствующее ему число состояний (кратность вырождения).

4.5. Частицы с массой m и энергией E движутся слева на потенциальный барьер (рис. к задаче 4.4). Найти:

- а) коэффициент отражения R этого барьера при $E > U_0$;
- б) эффективную глубину проникновения частиц в область $x > 0$ при $E < U_0$, т.е. расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности нахождения частицы уменьшается в e раз.

4.6. В угарном газе CO из-за возбуждения молекул наблюдается пик поглощения инфракрасного излучения на длине волны $\lambda = 4,61$ мкм. 1) Определить амплитуду A_0 нулевых колебаний мо-



К задаче 4.4

лекулы CO; 2) оценить температуру, при которой амплитуда тепловых колебаний превзойдет A_0 . Приведенная масса молекулы CO $\mu = m_O m_C / (m_O + m_C) \approx 11,3 \cdot 10^{-27}$ кг.

4.7. Волновая функция трехмерного изотропного осциллятора, характеризующегося классической частотой ω и приведенной массой μ , имеет вид $\psi = A(1 + \alpha r)e^{-\beta r^2}$, где A , α , β — некоторые константы. Определить энергию E этого состояния, главное квантовое число N и значения констант A , α , β . Энергия трехмерного осциллятора равна $E_N = \hbar\omega(N+3/2)$, N — главное квантовое число ($N = 1, 2, \dots$).

АТОМНАЯ ФИЗИКА

§ 13. Постулаты Бора

Нильс Бор (1885–1962) внес большой вклад в создание квантовой физики. Ему удалось установить особенности, принципиально отличающие квантовую физику от классической. Эти особенности были сформулированы Бором в виде нескольких постулатов. Последующее построение квантовомеханической теории проводилось так, чтобы она включала постулаты Бора как свою неотъемлемую часть.

Постулаты Бора. Опираясь на результаты своих опытов по рассеянию α -частиц при прохождении пучков таких частиц через тонкие слои вещества, Резерфорд (1871–1937) предложил в 1911 году ядерную модель атома. Тяжелое положительно заряженное ядро с зарядом Ze (Z — атомный номер, e — модуль элементарного заряда) расположено в центре атома, оно имеет размеры, не превышающие 10^{-12} см. Вокруг ядра расположены Z электронов, распределенных по всему объему атома. Почти вся масса атома сосредоточена в ядре.

Согласно представлениям Бора, основанным на опытных данных, атом состоит из ядра и электронов, вращающихся вокруг ядра по круговым или эллиптическим орбитам. По законам классической электродинамики ускоренное движение электрона (в частности, движение по окружности или эллипсу) должно сопровождаться излучением электромагнитных волн, постепенным уменьшением энергии электрона и, в конечном счете, его падением на ядро. Хорошо известно, что на самом деле этого не происходит.

Первый постулат Бора состоит в следующем. Из бесконечного множества электронных орбит, возможных с точки зрения классической механики, в действительности осуществляются только некоторые дискретные орбиты. Электрон, находящийся на одной из этих орбит, несмотря на то, что он движется с ускорением, не излучает электромагнитных волн.

Согласно *второму постулату Бора* электромагнитное излучение испускается или поглощается атомом в виде кванта энергии $\hbar\omega$ при переходе электрона из одного стационарного состояния в другое. Величина кванта равна разности энергий стационарных состояний, между

которыми совершается переход:

$$\hbar\omega = E_n - E_m,$$

где \hbar — постоянная Планка, ω — частота электромагнитной волны, E_n и E_m — энергия атома в начальном и конечном стационарных состояниях.

Бор высказал также утверждение, что существуют только такие орбиты электрона в атоме, при движении по которым момент импульса L электрона равен целому числу постоянных Планка \hbar :

$$L = n\hbar,$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ — целое положительное число.

Дальнейшее развитие квантовой физики показало, что представление Бора о квантовании момента импульса является правильным, а его представления об электронных орбитах — не вполне точными. Орбиты, то есть траектории движения электрона не существуют; состояние электрона в атоме, пространственное распределение электронной плотности описывается волновой функцией. Модель строения атома по Бору объединяет в себе черты как классической, так и квантовой физики, ее можно назвать полуклассической. Несмотря на то, что модель является не вполне корректной, с ее помощью можно получить верное квантовомеханическое выражение для энергии электрона в атоме.

Элементарная боровская теория водородного атома. Пусть единственный электрон с массой m и зарядом e движется со скоростью V по круговой орбите радиуса r в кулоновском поле положительно заряженного атомного ядра с зарядом Ze . Уравнение движения электрона по круговой орбите, выражающее второй закон Ньютона, имеет вид

$$\frac{mV^2}{r} = \frac{kZe^2}{r^2}, \quad (13.1)$$

где $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$ — коэффициент пропорциональности в СИ.

Боровское условие квантования момента импульса электрона:

$$mVr = n\hbar, \quad (13.2)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

Совместно решая уравнения (13.1) и (13.2), найдем выражение, определяющее радиусы допустимых орбит r_n , которые зависят от целочисленного параметра n :

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{kZe^2 m}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13.3)$$

Формула (13.3) определяет радиусы так называемых *боровских орбит*.

Пример. Вычислим радиус первой боровской орбиты в атоме водорода ($n = 1$, $Z = 1$):

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{ke^2m} = \frac{4\pi \cdot 0,885 \cdot 10^{-11} (\text{Ф/м})(1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})^2}{(1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл})^2 0,91 \cdot 10^{-30} (\text{кг})} \approx 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Полученное значение r_1 по порядку величины совпадает с газкинетическим размером атома водорода.

Используя (13.3), найдем для электрона на n -й боровской орбите потенциальную энергию U (энергию взаимодействия электрона с ядром) и его кинетическую энергию T :

$$U = -\frac{kZe^2}{r_n} = -\frac{k^2Z^2e^4m}{\hbar^2n^2}, \quad (13.4)$$

$$T = \frac{mV^2}{2} = \frac{(mVr_n)^2}{2mr_n^2} = \frac{k^2Z^2e^2m}{2\hbar^2n^2}. \quad (13.5)$$

Полная энергия E атома складывается из кинетической энергии электрона (13.5) и энергии взаимодействия электрона с ядром (13.4):

$$E_n = T + U = -\frac{k^2Z^2e^4m}{2\hbar^2n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (13.6)$$

Формула (13.6) по форме совпадает с выражением для энергии электрона в атоме, которое получается путем строгого решения уравнения Шредингера (см. (16.15)). Однако физический смысл целочисленного параметра n в этих формулах разный. Согласно модели Бора число n определяет момент импульса электрона, который не может быть равен нулю (см. (13.2)); при квантовомеханическом решении задачи оказывается, что все вычисляемые по формуле (13.6) значения энергии атома возможны и при нулевом моменте импульса.

§ 14. Классификация состояний электронов. Квантовые числа

Атом водорода состоит из положительно заряженного ядра с зарядом e и движущегося вокруг него электрона с зарядом $-e$ (e — модуль элементарного заряда, $e \approx 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл).

Водородоподобным атомом будем называть систему, состоящую из положительно заряженного ядра с зарядом Ze ($Z = 1, 2, 3, \dots$) и движущегося вокруг него единственного электрона (при $Z = 1$ водородоподобный атом представляет собой атом водорода). Рассматриваемая система частиц при $Z \neq 1$ является ионом.

Многоядерные атомы состоят из положительно заряженного ядра с зарядом Ze и движущихся вокруг ядра электронов в количестве Z ($Z = 1, 2, 3, \dots$ — атомный номер).

Орбит или траекторий, по которым движутся электроны вокруг атомного ядра, не существует. Распределение электронной плотности в

пространстве описывается волновыми функциями. Однако для простоты изложения в данном параграфе мы будем пользоваться упрощенными представлениями об электронных орбитах. Более строгое квантовомеханическое изложение рассматриваемых здесь вопросов дается в параграфах 16, 17, 18.

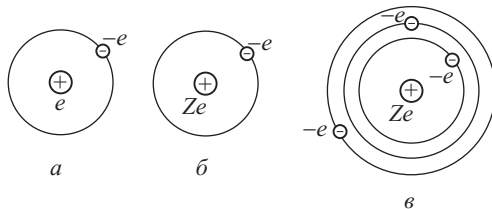


Рис. 29

На рис. 29 представлены схематично три типа описанных атомных систем — атом водорода (а), водородоподобный (б) и многоэлектронный (в) атом.

В силу сферической симметрии атома задачу о нахождении волновых функций и собственных значений энергии электрона удобно решать не в декартовых x , y и z , а в сферических r , θ и φ координатах с началом в центре атома. Потенциальная энергия водородоподобного атома или, иначе говоря, потенциальная энергия электрона в кулоновском поле ядра, равна:

$$U(r) = -\frac{kZe^2}{r}. \quad (14.1)$$

Рис. 30

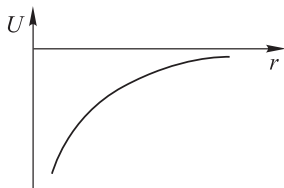


График этой функции показан на рис. 30.

Запишем уравнение Шредингера для стационарных состояний электрона:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{kZe^2}{r}\psi &= E\psi. \end{aligned} \quad (14.2)$$

Здесь $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ — волновая функция электрона, E — собственное значение энергии, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{kZe^2}{r}$ — оператор полной энергии, Δ — оператор Лапласа, который в сферических координатах имеет вид

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (14.3)$$

Из решения уравнения Шредингера (см. § 16–18), следует, что волновая функция электрона зависит от трех перечисленных ниже целочисленных параметров:

$$\begin{aligned} n &— \text{главное квантовое число,} \\ l &— \text{орбитальное квантовое число,} \\ m_l &— \text{магнитное квантовое число.} \end{aligned}$$

Имеется еще одна характеристика состояния электрона, существование которой вытекает из релятивистской квантовой теории:

$$m_s — \text{спиновое квантовое число.}$$

Перечисленные параметры называются *квантовыми числами*. Итак, волновая функция электрона в водородоподобном атоме зависит от четырех квантовых чисел n, l, m_l, m_s :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \theta, \varphi).$$

Для сравнения напомним, что волновая функция электрона в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками зависит от одного целочисленного параметра или квантового числа n (см. (9.6)).

Возможные значения и физический смысл квантовых чисел.

1. *Главное квантовое число* n определяет собственные значения энергии водородоподобного атома E_n :

$$E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2}. \quad (14.4)$$

где $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$, Z — атомный номер, e — заряд электрона, m — его масса.

Возможные значения главного квантового числа: $n = 1, 2, 3, \dots$

Набор собственных значений энергии водородоподобного атома (14.4) является дискретным или, как говорят, образует дискретный энергетический спектр. Вычисления по формуле (14.4) для атома водорода ($Z = 1$) дают:

$$\begin{aligned} E_1 &= -13,6 \text{ эВ}, & n &= 1; \\ E_2 &= -3,4 \text{ эВ}, & n &= 2; \\ E_3 &= -1,5 \text{ эВ}, & n &= 3; \\ E_4 &= -0,85 \text{ эВ}, & n &= 4; \\ E_5 &= -0,54 \text{ эВ}, & n &= 5; \end{aligned}$$

и т. д. Значения E_n нанесены на график функции потенциальной энергии (14.1) в виде энергетических уровней (рис. 31). При $n \rightarrow \infty$ густота уровней увеличивается, энергия E_n

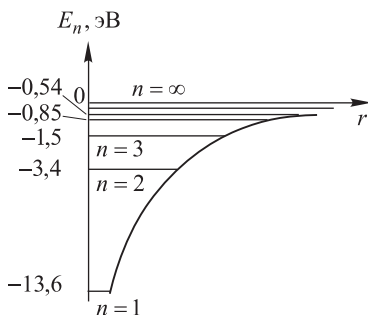


Рис. 31

стремиться к нулю. Если $E > 0$ электрон и ядро не образуют связанную систему, дискретные уровни энергии не возникают. Уровню с наименьшей энергией E_1 соответствует *основное* состояние атома, остальные уровни отвечают *возбужденным* состояниям.

Вывод формулы (14.4) с помощью решения уравнения Шредингера (14.2) приведен в § 16.

2. *Орбитальное квантовое число l* . Движущийся в центральном кулоновском поле электрон в водородоподобном атоме обладает вполне определенным моментом импульса, вычисленным относительно точки пространства, в которой расположено ядро. Обозначим этот момент через \mathbf{M}_l . Величину \mathbf{M}_l принято называть *орбитальным угловым моментом электрона* (рис. 32). В стационарном состоянии орбитальный угловой момент сохраняется, а при переходе атома из одного стационарного состояния в другое — изменяется. Таким образом, \mathbf{M}_l может принимать лишь дискретные значения (квантуется).

Орбитальное квантовое число l определяет модуль орбитального углового момента M_l :

$$M_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (14.5)$$

Возможные значения l :

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (14.6)$$

При заданном главном квантовом числе n число различных значений орбитального квантового числа l равно n (см. (14.6)).

3. *Магнитное квантовое число m_l* . Проекция орбитального углового момента \mathbf{M}_l на произвольную ось z , которую обозначим через M_{lz} , может принимать лишь дискретные значения, кратные постоянной Планка \hbar . Таким образом, величина M_{lz} квантуется (рис. 33).

Магнитное квантовое число m_l определяет проекцию орбитального углового момента на ось z , а именно:

$$M_{lz} = m_l \hbar. \quad (14.7)$$

Возможные значения m_l :

$$m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l. \quad (14.8)$$

При заданном орбитальном квантовом числе l магнитное квантовое число m_l имеет $(2l+1)$ различных значений.

4. *Спиновое квантовое число m_s* . Электрон обладает *собственным моментом импульса*, который принято называть *собственным угло-*

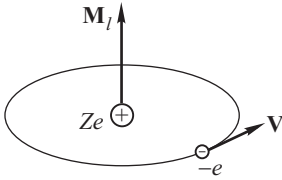


Рис. 32

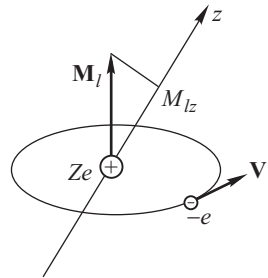


Рис. 33

вым моментом, или спиновым угловым моментом, или спином электрона. Обозначим собственный угловой момент электрона через \mathbf{M}_s . Условно можно представлять спин электрона как момент импульса вращающегося вокруг собственной оси заряженного по объему шарика (рис. 34).

Спиновое квантовое число s равно одной второй и определяет модуль собственного момента импульса электрона:

$$M_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad s = \frac{1}{2}. \quad (14.9)$$

Спиновое квантовое число m_s определяет проекцию M_{sz} собственного момента импульса электрона \mathbf{M}_s на произвольную ось z :

$$M_{sz} = m_s \hbar. \quad (14.10)$$

Число m_s может принимать два значения:

$$m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (14.11)$$

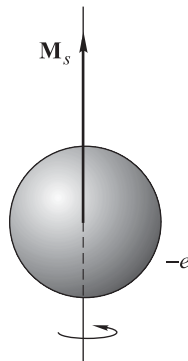


Рис. 34

Соответственно, проекция на ось z собственного углового момента электрона равна одному из двух возможных значений: $M_{sz} = \pm \frac{1}{2} \hbar$.

Спином электрона иногда называют значения квантовых чисел s и m_s . Например, когда говорят, что проекция спина электрона равна одной второй, имеют в виду, что проекция собственного углового момента электрона в единицах \hbar равна одной второй.

Вырождение энергетических уровней. Квантовым состоянием электрона в атоме называется стационарное состояние, которое характеризуется определенным набором квантовых чисел n, l, m_l, m_s и описывается соответствующей волновой функцией $\psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \theta, \varphi)$.

Одному и тому же значению главного квантового числа n могут соответствовать различные значения других квантовых чисел (см. (14.6), (14.8), (14.11)). Поскольку энергия водородоподобного атома зависит только от n (см. (14.4)), одному и тому же энергетическому уровню E_n соответствуют различные квантовые состояния.

Вырожденными называются квантовые состояния с одинаковой энергией, которые характеризуются различными наборами квантовых чисел и, соответственно, различными волновыми функциями.

Кратность вырождения — это число различных квантовых состояний, отвечающих одному и тому же уровню энергии.

Кратность вырождения энергетического уровня водородоподобного атома, который характеризуется главным квантовым числом n , равна $2n^2$.

Докажем это утверждение. Пусть число n задано. Ему соответствует n различных значений l (от 0 до $n-1$), каждому l соответствует $(2l+1)$ значение m_l (от $-l$ до $+l$), и наконец, каждому набору

значений n , l , m_l соответствует две проекции спина электрона $m_s = -1/2$ и $m_s = +1/2$. Полное число квантовых состояний с заданным значением n (кратность вырождения энергетического уровня) равно:

$$\text{Кратность вырождения} = 2 \cdot \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n \frac{1 + [2(n-1) + 1]}{2} = 2n^2,$$

что и требовалось доказать.

Энергию квантовых состояний с фиксированным значением n , но с различными значениями других квантовых чисел можно считать одинаковой, а соответствующие состояния называть вырожденными с точностью до так называемого тонкого расщепления уровней (см. § 18).

§ 15. Спектр водорода

Представления о стационарных состояниях позволяют объяснить наблюдаемые на опыте атомные спектры. Поглощение или испускание электромагнитного излучения происходит при переходе атома из одного стационарного состояния в другое. Рассмотрим закономерности, которые имеют место в спектре атома водорода, энергия стационарных состояний которого описывается формулой (14.4) при $Z = 1$.

Основное состояние атома водорода характеризуется главным квантовым числом $n = 1$. Это состояние с наименьшей возможной энергией, которая, согласно расчету по формуле (14.4), равна $E_1 = -13,6$ эВ. Такую же энергию основного состояния дает экспериментальное измерение *ионизационного потенциала* — энергии, необходимой для отрыва электрона от атома, деленной на заряд электрона (единица ионизационного потенциала равна 1 Дж/Кл = 1 В). Ионизация означает выбрасывание электрона с нижнего основного уровня атома ($E_1 = -13,6$ эВ) в область непрерывного энергетического спектра ($E \geq 0$), и может осуществляться, например, при столкновениях с атомами водорода электронов с энергией не ниже 13,6 эВ. Ионизационный потенциал атома водорода равен 13,6 В.

Возбужденное состояние атома возникает при переходе на один из уровней, лежащих выше основного. Возбужденное состояние атома водорода характеризуется главным квантовым числом $n > 1$. Для $n = 2, 3, 4$ и 5 энергия атома водорода, вычисленная по формуле (14.4), равна $E_2 = -3,4$ эВ, $E_3 = -1,5$ эВ, $E_4 = -0,85$ эВ, $E_5 = -0,54$ эВ соответственно.

Для перевода в возбужденное состояние атому необходимо сообщить энергию. Способы возбуждения могут быть различными: облучение электронами или фотонами, электрический разряд в веществе, нагрев вещества до высокой температуры и т.д. Время жизни атома в возбужденном состоянии — обычно величина порядка 10^{-8} с, в так называемых *метастабильных возбужденных* состояниях оно достигает 10^{-3} с, а иногда и 10^{-1} с. Возбужденные атомы самопроизвольно

переходят в состояние с меньшей энергией (соответственно, меньшими значениями главного квантового числа n). Освобождающаяся при таких переходах энергия часто испускается в виде электромагнитной волны.

Спектр атома называется набор частот (длин волн) электромагнитного излучения, испускаемого атомами при переходе из возбужденного состояния в состояние с меньшей энергией.

Спектральная линия — это электромагнитное излучение определенной частоты (длины волны), испускаемое атомом при переходе между двумя стационарными состояниями.

На рис. 35 изображены уровни энергии атома водорода, а стрелками обозначены переходы между уровнями, соответствующие наблюдаемым

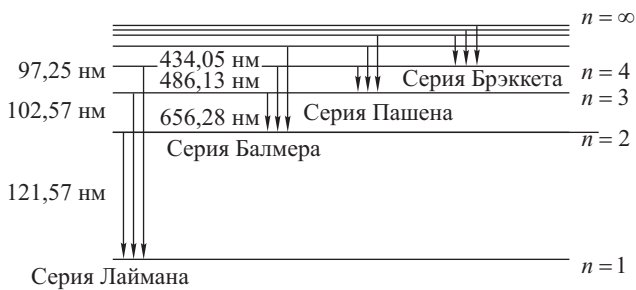


Рис. 35

спектральным линиям. Для некоторых переходов указаны экспериментальные значения длин волн.

Линии в спектре атома водорода образуют *спектральные серии*: все линии одной серии соответствуют переходам атома из всевозможных начальных состояний в одно и то же конечное состояние, то есть переходом электрона с различных начальных на один и тот же конечный энергетический уровень. Если обозначить главное квантовое число конечного уровня через n_k , начального — через n_n , то для всех линий одной серии n_n изменяется от $(n_k + 1)$ до ∞ (значению $n = \infty$, согласно (14.4), соответствует $E_n = 0$, то есть электрон и атомное ядро находятся в несвязанном состоянии). Самая длинноволновая линия серии (она соответствует переходу между соседними уровнями с квантовыми числами $n_n = n_k + 1$ и n_k) называется *головной линией* данной серии. *Границей серии* называется линия, соответствующая переходу между уровнями с $n_n = \infty$ и n_k . Линии серии сгущаются (разность частот соседних линий уменьшается) в направлении от головной линии к границе серии, то есть в сторону коротких волн. За границей серии спектр не обрывается, а становится сплошным.

Спектральная серия, соответствующая переходам из возбужденных состояний в состояние с $n_k = 1$ (основное состояние атома водорода), называется *серией Лаймана* (1874–1954). Она находится в ультрафи-

олетовой части спектра. Длина волны головной линии серии Лаймана 121,57 нм.

Серия с $n_k = 2$ носит название *серии Бальмера* (1825—1898). Четыре первые линии этой серии лежат в видимой области спектра и обозначаются через H_α (656,28 нм), H_β (486,13 нм), H_γ (434,05 нм), H_δ (410,17 нм). На этих четырех линиях Бальмером была выявлена закономерность, выражаемая формулой Бальмера (см. ниже). Остальные линии этой серии лежат в ультрафиолетовой области. Граница серии Бальмера равна 363,70 нм.

Серия с $n_k = 3$ называется *серией Пашена* (1865—1947), с $n_k = 4$ — *серией Брэкетта*, с $n_k = 5$ — *серией Пфунда* (1879—1949); все они расположены в инфракрасной области спектра.

Формула Бальмера. С помощью формулы (14.4) можно рассчитать частоту ω перехода между уровнями энергии атома. При переходе атома водорода ($Z = 1$) из начального состояния с главным квантовым числом n_n в конечное с главным квантовым числом n_k ($n_n > n_k$) излучается электромагнитный квант энергии:

$$\hbar\omega = E_{n_n} - E_{n_k} = -\frac{k^2 m e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_n^2} - \frac{1}{n_k^2} \right).$$

Частота испущенного света равна:

$$\omega = \frac{E_{n_n} - E_{n_k}}{\hbar} = \frac{k^2 m e^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{n_n^2} - \frac{1}{n_k^2} \right).$$

Мы пришли к обобщенной *формуле Бальмера*, с помощью которой можно представить частоты всех линий спектра атома водорода:

$$\omega = R \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_n^2} \right), \quad (15.1)$$

где R — константа, называемая *постоянной Ридберга* (1854—1919).

Постоянная Ридберга равна:

$$R = \frac{k^2 e^4 m}{2\hbar^3}. \quad (15.2)$$

При подстановке в (15.2) числовых значений $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$, массы m и заряда e электрона, постоянной Планка \hbar получается значение $R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$, которая хорошо согласуется с экспериментальным значением. В формуле (15.1) n_k имеет значение 1 для серии Лаймана, 2 — для серии Бальмера, 3 — для серии Пашена и т. д.

Ширина спектральных линий. Из оптики известно, что испускание света происходит в виде волновых цугов, имеющих обычно длину порядка нескольких метров и длительность τ порядка 10^{-8} с , равную времени жизни атома в возбужденном состоянии (см. выше). Цуг конечной длины и длительности не может быть вполне монохроматическим и всегда несколько «размазан» по частоте. Таким образом, всякая

спектральная линия имеет конечную ширину $\Delta\omega$. Интервал частот $\Delta\omega$ излучения, присутствующего в составе волнового цуга длительно-стью τ удовлетворяет соотношению (см. в кн. 4 «Колебания и волны. Оптика», § 27):

$$\Delta\omega \cdot \tau = 2\pi.$$

Неопределенность испускаемой атомом световой волны по частоте может возникнуть только в том случае, если энергия возбужденных состояний атома определена не вполне точно, то есть если энергетические уровни возбужденных состояний имеют некоторую ширину. Умножим предыдущее равенство на \hbar :

$$\hbar\Delta\omega \cdot \tau = 2\pi\hbar,$$

$$\Delta E \cdot \tau = 2\pi\hbar,$$

где введено обозначение $\Delta E = \hbar\Delta\omega$ — ширина энергетического уровня, соответствующего возбужденному состоянию атома; τ — среднее время жизни атома в возбужденном состоянии.

Если среднее время жизни τ атома в возбужденном состоянии по порядку величины равно 10^{-8} с, то ширина соответствующего энергетического уровня $\Delta E = 2\pi\hbar/\tau \approx 6,6 \cdot 10^{-26}$ Дж $\sim 10^{-7}$ эВ, что много меньше расстояния между соседними уровнями.

§ 16. Распределение электронной плотности в водородоподобном атоме

Энергетические уровни водородоподобных атомов. Потенциальная энергия электрона в кулоновском поле положительно заряженного ядра водородоподобного атома равна:

$$U(r) = -\frac{kZe^2}{r}, \quad (16.1)$$

где Z — заряд ядра в единицах элементарного заряда, r — расстояние от центра атома до электрона, e — элементарный заряд, $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$.

Если полная энергия E электрона положительная, то электрон не принадлежит атому и может уходить на бесконечно большое расстояние от ядра; при этом E не квантуется, а меняется непрерывно. Запишем уравнение Шредингера для электрона, связанного с атомом ($E < 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{kZe^2}{r}\psi = E\psi, \quad (16.2)$$

где m — масса электрона.

В силу сферической симметрии рассматриваемой физической системы удобно решать уравнение (16.2) в сферических координатах, считая волновую функцию ψ функцией трех переменных: $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$, где θ — полярный, φ — азимутальный углы, r — расстояние от центра атома до точки наблюдения. Сначала ограничимся исследованием ре-

шений, которые не зависят от θ и φ . Оператор Лапласа Δ в сферических координатах при условии, что ψ зависит только от r , имеет вид (см. (14.3)):

$$\Delta_r = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}. \quad (16.3)$$

Подставив (16.3) в (16.2), получим

$$\psi'' + \frac{2}{r}\psi' + \frac{\beta}{r}\psi = q^2\psi, \quad (16.4)$$

где $\psi'' = d^2\psi/dr^2$, $\psi' = d\psi/dr$, введены обозначения:

$$\beta = \frac{2kmZe^2}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}. \quad (16.5)$$

Будем искать решение (16.4) в виде

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}. \quad (16.6)$$

Подставим в (16.4) выражение $\psi(r)$ из (16.6), а также его производные:

$$\psi' = \frac{u'}{r} - \frac{1}{r^2}u, \quad \psi'' = \frac{u''}{r} - \frac{2}{r^2}u' + \frac{2}{r^3}u.$$

Уравнение Шредингера будет иметь вид

$$u'' + \beta \frac{u}{r} = q^2 u. \quad (16.7)$$

Учитывая, что при условии $r \rightarrow \infty$ уравнение (16.7) приближенно можно представить в виде $u'' - q^2 u = 0$, и его решением является функция $Ae^{-qr} + Be^{qr}$, где необходимо положить $B = 0$ в силу ограниченности волновой функции, решение уравнения (16.7) будем искать в следующем виде:

$$u(r) = f(r)e^{-qr}. \quad (16.8)$$

Подставим в (16.7) $u(r)$ из (16.8), а также производные этой функции:

$$u' = -qe^{-qr}f + f'e^{-qr}, \quad u'' = q^2e^{-qr}f - 2qe^{-qr}f' + f''e^{-qr}.$$

После приведения в (16.7) подобных членов:

$$f'' - 2qf' + \frac{\beta}{r}f = 0. \quad (16.9)$$

Решение этого уравнения ищем в виде степенного ряда:

$$f(r) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m r^m. \quad (16.10)$$

Подставим $f(r)$ из (16.10) в уравнение (16.9), в результате получим:

$$\sum_{m=1}^{\infty} a_m m(m-1)r^{m-2} - 2q \sum_{m=1}^{\infty} a_m m r^{m-1} + \beta \sum_{m=1}^{\infty} a_m r^m = 0. \quad (16.11)$$

Так как равенство (16.11) должно удовлетворяться тождественно для любых значений r , сумма коэффициентов при любой степени r равна нулю. В частности, это справедливо для коэффициента при r^{n-1} :

$$a_{n+1}(n+1)n - qa_n n + \beta a_n = 0.$$

Отсюда находим рекуррентную формулу для коэффициентов ряда (16.10):

$$a_{n+1} = a_n \frac{2qn - \beta}{n(n+1)}. \quad (16.12)$$

Как следует из (16.12), в зависимости от соотношения между q и β ряд (16.10) либо обрывается на некотором n -м члене, то есть является полиномом, либо является бесконечным. Если ряд не обрывается, то при $n \rightarrow \infty$ из (16.12) имеем

$$\frac{a_{n+1}}{a_n} \approx a \frac{2q}{n+1}.$$

Такая рекуррентная формула справедлива для коэффициентов ряда:

$$e^{2qr} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (2qr)^n. \quad (16.13)$$

Таким образом, если ряд (16.10) бесконечный, то при больших n

$$f(r) \approx e^{2qr},$$

а $\psi(r)$ (см. (16.6)) ведет себя (зависит от r) также, как функция

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} = \frac{f(r)e^{-qr}}{r} \approx \frac{e^{qr}}{r}.$$

Поскольку $\psi(r)$ неограниченно возрастает при $r \rightarrow \infty$, такое решение уравнения (16.9) должно быть отброшено.

Для того чтобы искомое решение уравнения Шредингера (16.4) имело физический смысл (волновая функция была ограниченной), ряд (16.10) должен обрываться на некотором n -м члене. При этом числитель (16.12) обращается в нуль:

$$2qn - \beta = 0.$$

Отсюда

$$q_n = \frac{\beta}{2n}, \quad (16.14)$$

где n — некоторое целое число, которое является порядковым номером последнего отличного от нуля члена ряда (16.10) или иначе наивысшей степени r соответствующего полинома.

Подставив в (16.14) значения q и β из (16.5), найдем возможные значения энергии водородоподобного атома:

$$E_n = -\frac{k^2 m e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (16.15)$$

Формула (16.15) совпадает с выражением (13.6), полученным в рамках полуклассической боровской модели атома водорода. Согласно (16.15) уровни энергии атома являются дискретными. Дискретность возникает из того условия, что волновая функция электрона $\psi(r)$ должна быть конечной на сколь угодно больших расстояниях от ядра.

Решения уравнения Шредингера (16.2), которые мы ищем, не представляют собой полного набора, поскольку заведомо не рассматриваются волновые функции, зависящие от углов θ и φ . Уровни энергии (16.15) — это энергия состояний, не зависящих от углов θ и φ , то есть состояний с нулевым моментом импульса электрона. Однако электрическое поле точечного заряда (кулоновское поле) обладает таким свойством, что учет решений уравнения Шредингера с ненулевыми значениями момента импульса не приводит к появлению новых уровней энергии. Поэтому формула (16.15) содержит все уровни энергии атома водорода и водородоподобных атомов (с точностью до тонкого расщепления уровней, см. § 18).

Объединяя (16.6), (16.8) и (16.10), найдем вид волновой функции электрона в водородоподобном атоме:

$$\psi_n(r) = \frac{e^{-qr}}{r} \sum_{m=1}^n a_m r^m. \quad (16.16)$$

Здесь для вычисления a_m следует применить рекуррентную формулу (16.12). Входящий в (16.12) параметр β определяется из (16.5). Зависящее от n значение q находится по формуле (16.14).

Найдем ψ -функцию для основного состояния атома ($n = 1$). Пусть условие (16.14) выполнено для $n = 1$, при этом $q_1 = \beta/2$. Из (16.12) следует: $a_2 = (2q_1n - \beta)a_1/n(n+1) = 0$, то есть ряд (16.10) обрывается на первом члене. Здесь через a_1 обозначен коэффициент первого члена ряда (16.10). Тогда из (16.16) получаем

$$\psi_1(r) = a_1 e^{-q_1 r}. \quad (16.17)$$

Здесь $q_1 = \beta/2 = kZme^2/\hbar^2$. Значение a_1 можно определить из условия нормировки $\int |\psi|^2 dV = 1$.

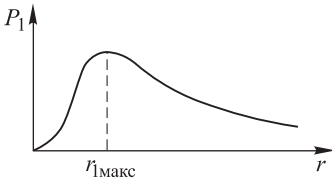


Рис. 36

Вероятность нахождения электрона в шаровом слое радиуса r и толщины dr равна $4\pi r^2 dr |\psi_1(r)|^2$, то есть определяется функцией:

$$P_1(r) = 4\pi r^2 |\psi_1(r)|^2 = 4\pi a_1^2 r^2 e^{-2q_1 r}. \quad (16.18)$$

График функции $P_1(r)$ (16.18) показан на рис. 36. Функция $P_1(r)$, определяющая пространственное распределение электрона в невозбужденном атоме водорода, обращается в нуль в начале координат и экспоненциально убывает при больших r . Значение $r = r_{1\max}$, при котором

функция $P(r)$ достигает максимума, находится из условия равенства нулю производной этой функции по r . Расчет $r_{1\max}$ дает:

$$r_{1\max} = \frac{1}{q_1} = \frac{\hbar^2}{kZme^2} \approx 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

что совпадает с радиусом первой боровской орбиты электрона в атоме водорода (числовое значение получено при $Z = 1$); $r_{1\max}$ определяет по порядку величины размер атома водорода (газокинетический радиус атома).

При $n = 2$ волновая функция электрона соответствует первому возбужденному состоянию атома. Находим при $n = 2$ из (16.14) $q_2 = \beta/4$, а из (16.12) при $n = 1$ $a_2 = -a_1\beta/4 = -q_2a_1$. Ряд (16.10) обрывается на втором члене ($a_3 = 0$), и волновая функция (16.16) имеет вид

$$\psi_2(r) = a_1 e^{-q_2 r} (1 - q_2 r). \quad (16.19)$$

На рис. 37 изображен график функции $P_2(r) = 4\pi r^2 |\psi_2(r)|^2$, которая характеризует вероятность обнаружить электрон в любой точке на расстоянии r от ядра. Общим свойством всех волновых функций электрона в атоме является отличная от нуля вероятность обнаружения электрона как вблизи ядра, так и на больших расстояниях от него.

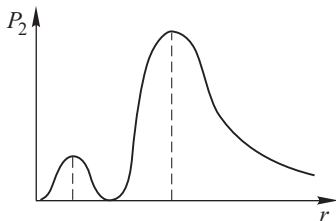


Рис. 37

§ 17. Угловой момент

Момент импульса частицы при движении в центральном силовом поле сохраняется. В частности, это относится к электрону, который движется в центральном поле кулоновских сил ядра в атоме водорода или водородоподобном атоме. Момент импульса замкнутой системы частиц, например, жестко связанных друг с другом атомов молекулы, также сохраняется. Рассмотрим сначала общие квантовомеханические свойства момента импульса произвольной частицы, а затем полученные результаты применим для описания движения электрона в атоме.

В квантовой механике момент импульса частицы принято называть *угловым моментом*. Такая терминология обусловлена тем обстоятельством, что в сферической системе координат операторы проекции момента импульса на координатную ось и квадрата момента импульса зависят только от полярного и азимутального углов θ и φ соответственно и не зависят от расстояния r до точки, относительно которой они вычисляются (неподвижного начала), то есть оба оператора определяются только направлением в пространстве и не меняются при изменении неподвижного начала отсчета.

Проекция углового момента на ось. Пусть \mathbf{M} — угловой момент частицы, M_z — его проекция на некоторую произвольную ось z . Учитывая, что, согласно (7.20), оператор проекции момента равен $\widehat{M}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$, найдем собственные значения M_z и собственные функции $\psi(\varphi)$ оператора \widehat{M}_z , решив с этой целью уравнение

$$\begin{aligned}\widehat{M}_z\psi &= M_z\psi, \\ -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} &= M_z\psi.\end{aligned}\quad (17.1)$$

Решением является функция вида

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\frac{M_z}{\hbar}\varphi}, \quad (17.2)$$

где множитель $1/\sqrt{2\pi}$ получен из условия нормировки $\int_0^{2\pi} \psi^*\psi d\varphi = 1$. Функция (17.2) должна быть однозначной, что подразумевает выполнение условия

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi).$$

Применив это условие к функции (17.2), получим

$$\frac{M_z}{\hbar} 2\pi = 2m\pi,$$

где m — целое число. Отсюда находим

$$M_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (17.3)$$

Равенство (17.3) означает, что проекция M_z углового момента на произвольную ось z может принимать лишь дискретные значения, равные целому числу постоянных Планка (проекция момента квантуется).

Как следует из (17.2) с учетом (17.3), собственные функции оператора проекции момента имеют следующий вид:

$$\psi = c_m e^{im\varphi}, \quad (17.4)$$

где c_m — постоянные коэффициенты. Основываясь на теореме Фурье можно утверждать, что волновая функция произвольного состояния частицы (не обязательно собственного состояния проекции момента \widehat{M}_z) представляет собой линейную комбинацию функций вида (17.4).

Квадрат углового момента. Найдем возможные значения квадрата момента импульса частицы M^2 . Оператор квадрата момента \widehat{M}^2 имеет громоздкий вид, а решение уравнения $\widehat{M}^2\psi = M^2\psi$ с целью нахождения собственных функций и собственных значений этого оператора требует знакомства со специальными функциями — полиномами Лежандра. Поэтому получим выражение для квадрата момента импульса другим способом.

Рассмотрим сферически симметричное состояние частицы с заданным значением квадрата углового момента M^2 (например, сферически

симметричное состояние электрона в атоме). В таком состоянии средние значения квадратов проекций момента \mathbf{M} на оси x , y и z одинаковы и равны одной трети среднего квадрата момента:

$$\frac{1}{3}\langle M^2 \rangle = \langle M_z^2 \rangle = \langle M_x^2 \rangle = \langle M_y^2 \rangle. \quad (17.5)$$

Согласно (17.3) возможные значения M_z равны целому числу постоянных Планка:

$$M_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots, \pm m_{\max}\hbar, \quad (17.6)$$

где m_{\max} — наибольшее возможное значение квантового числа m в рассматриваемом состоянии частицы (с заданным значением M^2).

Введем обозначение:

$$m_{\max} = l. \quad (17.7)$$

Тогда полный набор возможных значений M_z следующий:

$$M_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots, \pm l\hbar. \quad (17.8)$$

Сферически симметричное состояние частицы не обладает какой-либо определенной проекцией углового момента на ось z . Оно является суперпозицией состояний со всеми возможными проекциями M_z , причем все возможные значения M_z (17.8) равновероятны. Поэтому среднее значение квадрата проекции момента равно:

$$\begin{aligned} \langle M_z^2 \rangle &= \hbar^2 \frac{(-l)^2 + (l-1)^2 + \dots + l^2}{2l+1} = 2\hbar^2 \frac{1^2 + 2^2 + \dots + l^2}{2l+1} = \\ &= \frac{2\hbar^2}{2l+1} \frac{l(l+1)(2l+1)}{6} = \frac{\hbar^2}{3} l(l+1). \end{aligned} \quad (17.9)$$

Из (17.5) с учетом (17.9) получим

$$\langle M^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1). \quad (17.10)$$

Поскольку рассматриваемое состояние частицы является собственным состоянием квадрата момента M^2 , в этом состоянии среднее значение физической величины M^2 должно быть равно самой величине: $\langle M^2 \rangle = M^2$. С учетом этого из (17.9) получаем

$$M^2 = \hbar^2 l(l+1). \quad (17.11)$$

Формула (17.11) определяет закон квантования квадрата момента импульса частицы, в ней l — целое положительное число или нуль.

Итак, если квантовое число, определяющее квадрат момента импульса, равно l , то квантовое число m , определяющее проекцию на ось z углового момента $M_z = m\hbar$, может принимать следующие значения (см. (17.8)):

$$m = -l, (-l+1), \dots, (l-1), l. \quad (17.12)$$

Как следует из (17.8) и (17.11), наибольшее возможное значение квадрата проекции момента на ось z меньше квадрата момента, а именно:

$$(M_{z\max})^2 = (l\hbar)^2 < \hbar^2 l(l+1) = M^2. \quad (17.13)$$

Полученный результат (17.13) подразумевает, что вектор момента импульса частицы \mathbf{M} не может располагаться строго параллельно оси z , как бы ни было выбрано направление этой оси. Объяснение этого необычного с точки зрения классической механики утверждения состоит в следующем. Можно доказать, что *проекции момента импульса на две различные координатные оси, например, M_z и M_x , не могут быть одновременно определены с абсолютной точностью; для них существует соотношение неопределенностей, аналогичное соотношению неопределенностей координаты и импульса частицы.* Если проекция M_z фиксирована, то проекции M_x и M_y имеют неопределенности, они являются «размазанными», при этом средние значения M_x^2 и M_z^2 отличны от нуля:

$$\langle M_x^2 \rangle > 0, \quad \langle M_y^2 \rangle > 0.$$

В силу этого имеем

$$\langle M^2 \rangle = \langle M_x^2 \rangle + \langle M_y^2 \rangle + \langle M_z^2 \rangle > \langle M_z^2 \rangle,$$

то есть средний квадрат момента больше среднего квадрата его проекции на произвольную ось z . Это справедливо и для квадратов рассматриваемых величин:

$$M^2 = \langle M^2 \rangle > \langle M_z^2 \rangle = M_z^2.$$

Таким образом, в силу соотношения неопределенностей при фиксированном M_z вектор момента \mathbf{M} не имеет определенного направления в пространстве. Это означает, что оператор момента \hat{M} не имеет собственных функций и соответствующих им собственных значений. Вместе с тем, в квантовой механике доказывается, что квадрат момента

M^2 и одна из его проекций (обычно берется проекция M_z) могут быть точно определены одновременно. Задание M^2 и M_z полностью определяет вращательное состояние частицы, это состояние является собственным для квадрата и проекции углового момента частицы.

Наглядное представление о связи между модулем момента импульса \mathbf{M} и его проекцией M_z на одно избранное направление дают векторные диаграммы. По оси z откладывают возможные значения $M_z = \hbar m$, рассматривая их как проекции вектора \mathbf{M} длины $M =$

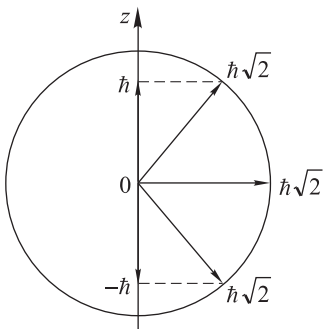


Рис. 38

$= \hbar \sqrt{l(l+1)}$. В качестве примера на рис. 38 приведена векторная диаграмма для случая $l = 1$ и $m = -1, 0, +1$. Векторные диаграммы нельзя понимать буквально. Они правильно передают только два факта: возможные значения m и возможные значения квадрата углового момента M^2 .

Угловой момент электрона. Вернемся к атому водорода или водородоподобному атому. Обозначим угловой момент электрона, обусловленный его движением вокруг атомного ядра, через l (*орбитальный угловой момент электрона*), его проекцию на ось z — через l_z . Собственные значения операторов квадрата момента и его проекции на ось z в соответствии с (17.11), (17.6) и (17.12) равны:

$$l^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (17.14)$$

$$l_z = \hbar m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (17.15)$$

Здесь l — *орбитальное квантовое число*, m_l — *магнитное квантовое число*.

Обратим внимание, что, согласно общепринятым обозначениям, l — это квантовое число, которое определяет квадрат орбитального углового момента электрона и является безразмерной величиной; l — это вектор орбитального углового момента электрона, который имеет ту же размерность, что и \hbar [Дж · с]. Таким образом, l не является обозначением модуля l .

Принята следующая классификация состояний электрона в атоме: состояние с $l = 0$ называется *s*-состоянием, состояния с $l = 1, 2, 3, 4, 5 \dots$ называются соответственно *p, d, f, g, h* и так далее по алфавиту (за исключением уже использованных *s* и *p*).

Выше при решении уравнения Шредингера для атома водорода был получен вид сферически симметричной ψ -функции состояний с $l = 0$, то есть *s*-состояний (см. (16.16)). Можно показать, что при $l \neq 0$ волновая функция электрона представляется в виде произведения функции, зависящей только от r (обозначим ее через $\psi_{\text{рад}}(r)$), и функции, зависящей только от углов θ и φ (обозначим эту функцию через $\psi_{\text{угл}}(\theta, \varphi)$):

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \psi_{\text{рад}}(r) \psi_{\text{угл}}(\theta, \varphi). \quad (17.16)$$

Энергия электрона в рассматриваемых состояниях с $l \neq 0$ определяется по формуле, аналогичной (16.15):

$$E_n = -\frac{k^2 m e^4 Z^2}{2 \hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (17.17)$$

Здесь n — это так называемое *главное квантовое число*. Оно равно:

$$n = n_r + l, \quad (17.18)$$

где l — орбитальное квантовое число ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$); n_r — *радиальное квантовое число* (оно равно $n_r = n - l$ и может принимать следующие значения: $n_r = n, n-1, \dots, 2, 1$). Радиальная часть $\psi_{\text{рад}}(r)$

волновой функции (17.16) зависит только от радиального квантового числа n_r , угловая часть $\psi_{\text{угл}}(\theta, \varphi)$ — от двух квантовых чисел l и m .

В соответствии с (17.17) энергия электрона определяется главным квантовым числом n , равным сумме n_r и l , и не зависит от каждого из этих чисел в отдельности. Таким образом, всем состояниям с $0 \leq l < n - 1$ отвечает одинаковая энергия.

Спин электрона. Электрон обладает так называемым *собственным угловым моментом*, иначе называемым *спиновым угловым моментом* или *спином*. Собственный угловой момент электрона обозначается через s . Условно можно считать, что спин обусловлен вращением электрона вокруг собственной оси (о недостатках такого представления см. ниже). Существование собственного углового момента электрона доказано экспериментально в опытах по расщеплению атомных и молекулярных пучков в неоднородном магнитном поле, поставленных в 1921 г. Штерном (1888–1969) и Герлахом (1889–1979). Существование собственного углового момента электрона вытекает также из уравнения Дирака (1902–1984), которое заменяет уравнение Шредингера в релятивистской квантовой механике.

Квадрат собственного углового момента электрона s и его проекция s_z на произвольную ось z принимают лишь дискретные значения (квантуются) по обычным правилам квантования углового момента аналогично (17.3) и (17.11):

$$s^2 = \hbar^2 s(s+1) = \frac{3}{4} \hbar^2, \quad (17.19)$$

$$s_z = \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar. \quad (17.20)$$

Здесь *спиновое квантовое число* s , определяющее собственные значения квадрата собственного момента электрона, равно:

$$s = \frac{1}{2}. \quad (17.21)$$

Магнитное квантовое число m_s , определяющее проекции спинового углового момента на произвольную ось z , имеет два значения:

$$m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (17.22)$$

Во избежание недоразумений, как и в случае орбитального углового момента отметим, что, согласно принятым в литературе обозначениям, спиновое квантовое число s — это безразмерная величина, которая не является модулем вектора собственного углового момента s (s имеет такую же размерность как \hbar , то есть Дж·с).

Значение $1/2$ для спинового квантового числа s может быть получено из опытов Штерна и Герлаха, в которых пучок невозбужденных атомов водорода, движущихся в неоднородном магнитном поле, расщеплялся на две компоненты. Этот результат подразумевает, что магнитный момент атома, наличие которого и вызывает расщепле-

ние, имеет две проекции на направление магнитного поля. Поскольку в основном состоянии орбитальный угловой момент электрона в атоме водорода равен нулю, то равен нулю и связанный с ним *орбитальный магнитный момент* (см. ниже § 18). В этом случае должны существовать две проекции на направление магнитного поля *собственного магнитного момента* электрона и, следовательно, *собственного углового момента*, не связанного с орбитальным движением. Если s — квантовое число, определяющее квадрат собственного углового момента, то число его проекций на произвольное направление, в частности, направление магнитного поля, равно $2s + 1$ (см. (17.8)). Из равенства $2s + 1 = 2$ получаем: $s = 1/2$.

Первоначально предполагали, что спин электрона обусловлен вращением этой частицы вокруг собственной оси, и при этом отдельные части электрона движутся с одинаковой угловой, но разными линейными скоростями. Однако размер электрона настолько мал (менее 10^{-14} см), что линейные скорости, которые должны иметь наружные части электрона при $s_z = \pm \hbar/2$, превосходят скорость света. Таким образом, нерелятивистское объяснение собственного углового момента электрона невозможно. В релятивистской квантовой механике существование двух проекций спина электрона следует из уравнения Дирака.

Кратность вырождения уровней энергии. Энергия электрона в водородоподобном ионе является одинаковой для всех состояний с фиксированным значением главного квантового числа n и различных значений азимутального l , магнитного m_l и спинового m_s квантовых чисел (с точностью до так называемого тонкого расщепления уровней, о котором речь идет ниже в связи с магнитными свойствами атомов, см. § 18). Энергия вычисляется по формуле (17.17). Каждому n соответствуют всего n различных состояний с $0 \leq l \leq n - 1$; каждому значению l соответствуют $2l + 1$ различных состояний с $m_l = -l, \dots, 0, \dots, l$; каждому значению m_l соответствуют 2 различных состояния с $m_s = \pm 1/2$. Полное число состояний с фиксированным значением n и всеми возможными состояниями других квантовых чисел равно:

$$\sum_{l=1}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2. \quad (17.23)$$

Если уровню энергии соответствует больше чем одно состояние электрона, говорят, что он *вырожден* (см. § 14). Число состояний с одинаковой энергией называется *кратностью вырождения*. В водородоподобном атоме кратность вырождения уровня энергии, определяемого значением главного квантового числа n , вычисляется по формуле (17.23).

Правила сложения угловых моментов. Найдем возможные значения суммарного углового момента \mathbf{L} системы из двух частиц, имею-

щих орбитальные моменты \mathbf{l}_1 и \mathbf{l}_2 . Угловые моменты складываются по правилам сложения векторов:

$$\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2. \quad (17.24)$$

Суммарный момент \mathbf{L} и его проекция L_z квантуются по известным правилам:

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2 L(L+1), \quad (17.25)$$

$$L_z = \hbar m_L, \quad (17.26)$$

здесь $L = 0, 1, 2, \dots$ — орбитальное квантовое число системы частиц, $m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$ — магнитное квантовое число, определяющее проекцию момента \mathbf{L} на ось z . Можно доказать, что квантовое число L может принимать следующие значения:

$$|l_1 - l_2| \leq L \leq l_1 + l_2. \quad (17.27)$$

Число различных значений L равно $2l_2 + 1$ при условии $l_1 > l_2$ или равно $2l_1 + 1$ при условии $l_2 > l_1$.

Отметим, что правила сложения моментов (17.24)–(17.27) не зависят от того, являются ли моменты орбитальными или спиновыми.

Определим полный угловой момент электрона в водородоподобном атоме \mathbf{j} . Он складывается из орбитального \mathbf{l} и спинowego \mathbf{s} моментов:

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}. \quad (17.28)$$

Квантовое число j , называемое *внутренним квантовым числом*, определяет полный угловой момент электрона:

$$\mathbf{j}^2 = \hbar^2 j(j+1). \quad (17.29)$$

Величина j безразмерная (j не является модулем вектора \mathbf{j}). Возможные значения j следующие:

$$|l - s| \leq j \leq l + s.$$

При $l = 0$ $j = 1/2$, при $l \neq 0$ j принимает два значения: $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$.

Проекция полного углового момента электрона на какое-либо направление квантуется по правилу:

$$j_z = \hbar m_j, \quad (17.30)$$

где $m_j = -j, -(j-1), \dots, 0, \dots, j-1, j$, всего $2j+1$ значение.

Для описания состояния каждого электрона в водородоподобном и в многоэлектронном атоме (см. § 19) можно пользоваться любым набором четырех независимых квантовых чисел, например, числами n, l, m_l, m_s или набором n, l, j, m_s . В спектроскопии принято записывать набор чисел $n, l, j, 2s+1$, заменяя при этом число l соответствующей малой буквой латинского алфавита s, p, d и т.д. (см. текст ниже формулы (17.15)). Сначала пишут значение главного квантового числа

n , затем заменяющую число l буквы, значение j пишут в виде нижнего правого индекса у этой буквы, а в качестве верхнего индекса слева от этой буквы пишут число $2s + 1$, называемое *мультиплетностью уровня*. Мультиплетность $2s + 1$ показывает, сколькими способами спин может ориентироваться относительно орбитального момента l . В случае, когда записывается состояние отдельного электрона, значок мультиплетности по существу излишен, так как у каждого электрона $s = 1/2$ и всегда $2s + 1 = 2$. Поэтому при записи состояния отдельных электронов в многоэлектронных атомах (см. § 19) левый верхний индекс, показывающий мультиплетность уровня, мы будем опускать. В примерах, рассматриваемых в данном параграфе, при записи состояний электронов мультиплетность $2s + 1$ указывается (см. ниже). Если бы описывалось состояние не электрона, а частицы с другим значением спина s , то указание мультиплетности $2s + 1$ имело существенное значение.

Рассмотрим примеры. Состояние $3^0s_{1/2}$ называется «три дублет $s_{1/2}$ ». В нем $n = 3$, $l = 0$, $j = 1/2$. Слово дублет обычно подразумевает существование двух различных энергетических уровней (см. § 18), но в данном случае оно является чисто формальным, так как при $l = 0$ все направления ориентации спина s равноправны: энергия этих состояний одинакова. По существу состояние $3^2s_{1/2}$ является синглетом. Это же относится ко всем s -состояниям ($l = 0$).

Рассмотрим состояние электрона $4^0d_{3/2}$, называемое «четыре дублет $d_{3/2}$ ». В нем $n = 4$, $l = 0$, $j = l - s = 3/2$ (спиновый момент ориентирован против орбитального момента). В другом d -состоянии, а именно: $4^2d_{5/2}$, квантовые числа равны: $n = 4$, $l = 2$, $j = l + s = 5/2$ (ориентации спинового и орбитального моментов одинаковы). Таким образом, в состоянии d квантовое число j может принимать два различных значения $3/2$ и $5/2$, энергии этих состояний различны (см. ниже § 18). Поэтому состояние d действительно является дублетом. То же относится ко всем остальным состояниям с отличным от нуля значением квантового числа l : p , f , g , ...

§ 18. Магнитные свойства водородоподобных атомов

Орбитальный магнитный момент электрона. Движущиеся электрические заряды порождают в окружающем пространстве магнитное поле. Это относится и к электронам атома, которые, согласно классическим представлениям, вращаются по круговым орбитам вокруг атомного ядра. Движущийся по окружности радиуса r со скоростью V электрон (рис. 39) представляет собой элементарный контур с током, магнитный момент \mathbf{p}_m которого равен:

$$\mathbf{p}_m = I \mathbf{S} \mathbf{n} = -\frac{eV}{2\pi r} \pi r^2 \mathbf{n} = -\frac{e}{2} V r \mathbf{n}, \quad (18.1)$$

где I — сила тока в элементарном круговом контуре, равная произведению заряда электрона $-e$ на частоту его вращения вокруг ядра $V/2\pi r$, $S = \pi r^2$ — площадь элементарного контура с током, \mathbf{n} — единичный вектор нормали к поверхности контура. Величина \mathbf{p}_m в (18.1) представляет собой орбитальный магнитный момент электрона.

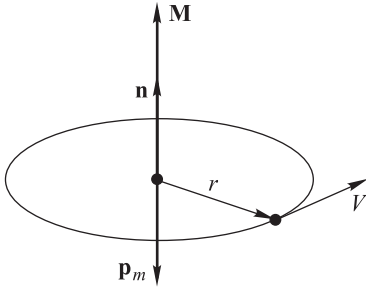


Рис. 39

Момент импульса \mathbf{M} движущегося по орбите электрона (орбитальный угловой момент) можно представить в виде:

$$\mathbf{M} = [\mathbf{r}, m\mathbf{V}] = mVr\mathbf{n}. \quad (18.2)$$

Сравнивая (18.1) с (18.2) найдем, что орбитальный магнитный \mathbf{p}_m и орбитальный механический \mathbf{M} моменты электрона связаны соотношением:

$$\mathbf{p}_m = -\frac{e}{2m}\mathbf{M}. \quad (18.3)$$

Из (18.3) видно, что магнитный момент электрона, движущегося по плоской круговой орбите, направлен противоположно механическому моменту (моменту импульса) и связан с ним множителем $e/2m$.

Аналогичная связь имеется для проекций на произвольную ось z орбитальных магнитного p_{mz} и механического M_z моментов:

$$p_{mz} = -\frac{e}{2m}M_z. \quad (18.4)$$

Равенства (18.3) и (18.4), которые в классической физике устанавливают связь между физическими величинами, в квантовой физике справедливы для операторов этих величин. Связь операторов орбитального углового момента электрона $\hat{\mathbf{l}}$ и его орбитального магнитного момента $\hat{\mathbf{p}}_m$ аналогична (18.3):

$$\hat{\mathbf{p}}_m = -\frac{e}{2m}\hat{\mathbf{l}}. \quad (18.5)$$

Связь операторов проекции на произвольную ось z орбитального углового момента \hat{l}_z и орбитального магнитного момента \hat{p}_{mz} электрона аналогична (18.4):

$$\hat{p}_{mz} = -\frac{e}{2m}\hat{l}_z. \quad (18.6)$$

Поскольку операторы $\hat{\mathbf{p}}_m$ и \hat{p}_{mz} отличаются от операторов $\hat{\mathbf{l}}$ и \hat{l}_z , соответственно, только числовым множителем $e/2m$, правила квантования магнитного и механического моментов по существу одинаковые. Так, в соответствии с (17.11) или (17.14) собственные значения оператора квадрата орбитального магнитного момента электрона $\hat{\mathbf{p}}_m^2$,

которые обозначим символом μ_l^2 , равны:

$$\mu_l^2 = \left(\frac{e}{2m}\right)^2 \hbar^2 = \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)^2 l(l+1), \quad (18.7)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$ — орбитальное квантовое число.

Собственные значения μ_{lz} оператора проекции на произвольную ось z орбитального магнитного момента электрона \hat{p}_{mz} в соответствии с (17.8) и (17.15) равны:

$$\mu_{lz} = -\frac{e}{2m} \hbar l_z = -\frac{e\hbar}{2m} m_l, \quad (18.8)$$

где $m_l = -l, -(l+1), \dots, 0, \dots, (l-1), l$ — магнитное квантовое число.

С учетом соотношения (18.8) становится понятным происхождение термина «магнитное квантовое число»: число m_l определяет возможные значения проекции магнитного момента электрона на некоторую произвольно выбранную ось z . Таким образом, проекции углового момента l_z и связанного с ним магнитного момента электрона μ_{lz} определяются одним и тем же квантовым числом m_l . Однако при этом l_z выражается в единицах \hbar (см. (17.15)), а μ_{lz} — в единицах $e\hbar/2m$ (см. (18.8)).

Единица измерения магнитного момента электрона $e\hbar/2m$ называется *магнетон Бора* и обозначается через μ_B :

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}. \quad (18.9)$$

Значение μ_B равно $0,9274 \cdot 10^{-23}$ Дж/Тл. (В литературе часто используется значение магнетон Бора в гауссовой системе СГС: $\mu_B = e\hbar/(2mc) = 0,9274 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гс.)

Используя величину μ_B , равенства (18.7) и (18.8) можно представить в следующем виде:

$$\mu_l^2 = \mu_B^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad (18.10)$$

$$\mu_{lz} = -\mu_B m_l, \quad m_l = -l, -(l+1), \dots, 0, \dots, (l-1). \quad (18.11)$$

Спиновый магнитный момент электрона. В опытах Штерна и Герлаха, которые упоминались выше, было установлено, что электрон обладает так называемым *собственным* или *спиновым магнитным моментом*, который связан с его спиновым угловым моментом s . Опытные данные свидетельствовали о том, что проекция на некоторое выделенное направление z (в частности, в опытах Штерна и Герлаха на направление магнитного поля) спинового магнитного момента электрона μ_{sz} принимает два значения, каждое из которых по модулю равно магнетону Бора μ_B (ср. с (18.8)):

$$\mu_{sz} = -\frac{e}{m} s_z = \frac{e\hbar}{m} m_s = 2 \frac{e\hbar}{2m} m_s = 2\mu_B m_s = \pm\mu_B, \quad (18.12)$$

где $s_z = \hbar m_s$ — проекция на ось z спинового углового момента электрона, $m_s = \pm 1/2$. Из сравнения (18.8) с (18.12) видно, что отношение орбитального магнитного момента к орбитальному угловому моменту

электрона, составляющее величину $\mu_{lz}/l_z = -e/2m$, вдвое меньше отношения спинового магнитного момента к спиновому механическому (угловому) моменту электрона, равного $\mu_{sz}/s_z = -e/m$; таким образом:

$$\frac{\mu_{sz}}{s_z} = 2 \frac{\mu_{lz}}{l_z}. \quad (18.13)$$

Отношение выраженного в числе магнетонов Бора μ_B магнитного момента частицы (орбитального или спинового), к выраженному в числе постоянных Планка \hbar механическому моменту (орбитальному или спиновому), называется *гиромагнитным отношением* g .

Гиромагнитное отношение орбитального магнитного и орбитального механического моментов с учетом формул (17.14) и (18.7), определяющих модули указанных моментов, или с учетом формул (17.15) и (18.8), определяющих проекции тех же моментов, равно единице:

$$g_{\text{орб}} = 1.$$

Гиромагнитное отношение спинового магнитного и спинового механического моментов с учетом формул (17.20) и (18.12), определяющих проекции указанных моментов, равно двум:

$$g_{\text{спин}} = 2.$$

Опытные факты, свидетельствующие о том, что отношение собственных магнитного и механического моментов электрона в два раза больше, чем для орбитальных моментов, сделали несостоятельными представления об электроны как о вращающемся вокруг собственной оси шарике. Спин следует считать внутренним свойством, присущим электрону, подобно тому как ему присущи заряд и масса.

Сложение магнитных моментов. Сложение орбитального \mathbf{l} и спинового \mathbf{s} магнитных моментов электрона приводит к сложению соответствующих магнитных моментов. Строгое квантовомеханическое рассмотрение этого вопроса сопряжено с серьезными математическими трудностями. Рассмотрим этот вопрос с помощью простой векторной модели.

Как указывалось выше, если полный угловой момент электрона равен

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}, \quad (18.14)$$

то собственные значения квадрата полного момента \mathbf{j} равны:

$$j^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad (18.15)$$

где возможные значения внутреннего квантового числа j равны: при $l \neq 0$ $j = l \pm 1/2$, при $l = 0$ $j = 1/2$.

Собственные значения проекции полного момента j_z на некоторую ось равны:

$$j_z = \hbar m_j, \quad (18.16)$$

где $m_j = -j, -(j-1), \dots, 0, \dots, (j-1), j$.

На рис. 40 показаны угловые моменты \mathbf{l} , \mathbf{s} и их векторная сумма — полный угловой момент электрона \mathbf{j} , причем за единицу длины этих векторов принята постоянная Планка \hbar . На этом же рисунке изображены орбитальный магнитный момент $\boldsymbol{\mu}_l$ и спиновый магнитный $\boldsymbol{\mu}_s$; за единицу длины векторов магнитных моментов принят магнетон Бора $\mu_B = e\hbar/2m$. Вектор $\boldsymbol{\mu}_l$, выраженный в магнетонах Бора, имеет ту же длину, что и вектор \mathbf{l} , выраженный в единицах \hbar (ср. (17.14) и (18.7)), а вектор $\boldsymbol{\mu}_s$, выраженный в магнетонах Бора, оказывается вдвое длиннее, чем вектор \mathbf{s} , выраженный в единицах \hbar (см. (17.20) и (18.12), а также соотношение (18.13), которое мы полагаем справедливым и для модулей рассматриваемых векторов). Таким образом, рис. 40 иллюстрирует следующие соотношения:

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}, \quad (18.17)$$

$$-\boldsymbol{\mu} = \mu_B \mathbf{l} + 2\mu_B \mathbf{s}, \quad (18.18)$$

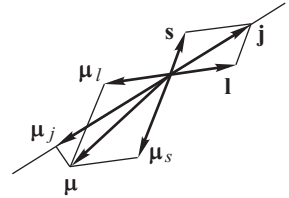


Рис. 40

Как видно из рис. 40, вектор суммарного магнитного момента электрона, равный $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s$, не параллелен вектору \mathbf{j} . Можно доказать, что проекция вектора $\boldsymbol{\mu}$ на направление вектора \mathbf{j} , обозначаемая как μ_j , сохраняется, а среднее значение проекции вектора $\boldsymbol{\mu}$ на перпендикулярное к \mathbf{j} направление равно нулю (в результате того, что вектор $\boldsymbol{\mu}$ быстро вращается вокруг направления \mathbf{j}).

Векторы \mathbf{j} и $\boldsymbol{\mu}_j$ (определение последнего ясно из рис. 40: $\boldsymbol{\mu}_j$ — это составляющая по направлению \mathbf{j} вектора полного магнитного момента $\boldsymbol{\mu}$ электрона) параллельны друг другу, соотношение между ними можно представить в следующем виде:

$$\boldsymbol{\mu}_j = -g\mu_B \mathbf{j}. \quad (18.19)$$

Здесь подразумевается, что вектор $\boldsymbol{\mu}_j$ выражен в магнетонах Бора, а вектор \mathbf{j} — в единицах \hbar (как и при изображении этих векторов на рис. 40); коэффициент пропорциональности g называется *фактором Ланде* (1888–1975). Фактор Ланде g для атомных электронов аналогичен гиромагнитному отношению g для отдельных частиц (см. (18.13) и нижеследующий текст).

Рассчитаем g с помощью представленной на рисунке 40 векторной модели. Воспользовавшись соотношениями (18.17) и (18.18), найдем проекцию $\boldsymbol{\mu}$ на направление, противоположное вектору \mathbf{j} :

$$\mu_j = -\frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{j}}{|\mathbf{j}|} = \mu_B \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{j} + 2\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}}{|\mathbf{j}|}.$$

Вектор $\boldsymbol{\mu}_j$ можно представить в виде:

$$\boldsymbol{\mu}_j = -\mu_j \frac{\mathbf{j}}{|\mathbf{j}|} = -\mu_B \frac{\mathbf{l} \cdot \mathbf{j} + 2\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}}{j^2} \mathbf{j}. \quad (18.20)$$

Сравнивая (18.20) с (18.19), и с учетом (18.17) получим

$$g = \frac{\mathbf{l}j + 2\mathbf{s}j}{j^2} = \frac{1}{j^2} (l(l+1) + 2s(s+1)) = \frac{l^2 + 2s^2 + 3sl}{j^2}.$$

Отсюда:

$$g\mathbf{j}^2 = \mathbf{l}^2 + 2\mathbf{s}^2 + 3\mathbf{s}l. \quad (18.21)$$

В квантовой механике аналогичное (18.21) соотношение справедливо для операторов соответствующих физических величин:

$$g\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + 2\hat{\mathbf{s}}^2 + 3\hat{\mathbf{s}}\hat{l},$$

а также их средних значений:

$$g\langle(\mathbf{j}^2)\rangle = \langle(\mathbf{l}^2)\rangle + 2\langle(\mathbf{s}^2)\rangle + 3\langle(\mathbf{s}l)\rangle. \quad (18.22)$$

Средние значения квадратов операторов равны собственным значениям соответствующих физических величин (см. (17.29), (17.14), (17.17)):

$$\langle(\mathbf{j}^2)\rangle = j(j+1), \quad (18.23)$$

$$\langle(\mathbf{l}^2)\rangle = l(l+1), \quad (18.24)$$

$$\langle(\mathbf{s}^2)\rangle = s(s+1). \quad (18.25)$$

Напомним, что в (18.23)–(18.25) квадраты векторов угловых моментов выражены в единицах \hbar^2 .

Возведем в квадрат (18.17) и выразим из полученного равенства $\mathbf{s}l$:

$$\mathbf{s}l = \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2 - \mathbf{s}^2 - \mathbf{l}^2).$$

Аналогичное равенство верно для средних значений:

$$\langle(\mathbf{s}l)\rangle = \frac{1}{2}[\langle(\mathbf{j}^2)\rangle - \langle(\mathbf{s}^2)\rangle - \langle(\mathbf{l}^2)\rangle] = \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]. \quad (18.26)$$

Подставим (18.23)–(18.26) в (18.22) и выразим фактор Ланде g :

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}. \quad (18.27)$$

Тонкая структура энергетических уровней водородоподобных атомов. Рассмотрим электрон в водородоподобном атоме, у которого азимутальное квантовое число l отлично от нуля ($l \neq 0$). Благодаря орбитальному движению электрона возникает некоторое магнитное поле B_l . Проекция спинового магнитного (и механического) момента электрона на направление магнитного поля может принимать два значения, соответствующих значениям спинового квантового числа $m_s = \pm 1/2$. Для рассматриваемого электрона возможны два состояния: $j_1 = l + 1/2$ и $j_2 = l - 1/2$. Спинный магнитный момент электрона в этих состояниях по-разному взаимодействует с магнитным полем, которое возникает благодаря орбитальному движению электрона. Это так называемое *спин-орбитальное взаимодействие*. Поэтому энергия

этих двух состояний различна, то есть уровни энергии с неравным нулю значением l являются двойными.

Так как величина порождаемого орбитальным движением электрона магнитного поля зависит от l , то состояния с одинаковым главным квантовым числом n , но с различными значениями l и j обладают разными энергиями. Расщепление энергетических уровней с фиксированным значением n из-за взаимодействия спинового и орбитального магнитных моментов электрона друг с другом носит название *тонкой структуры* уровней.

На рис. 41 показано расщепление уровней с $n = 2$ за счет спин-орбитального взаимодействия. Уровень с $l = 0$ не расщепляется, s -состояния с $m_s = \pm 1/2$ имеют одну и ту же энергию, так как порождаемое орбитальным движением магнитное поле в данном случае отсутствует.

Состоянию с $l = 1$ соответствуют два разных энергетических уровня. Для обозначения уровней с одинаковыми l , но с различной энергией используется классификация, учитывающая значения внутреннего квантового числа j . Обозначение $2p_{1/2}$ подразумевает, что $n = 2$, $l = 1$, $j = 1/2$;

обозначение $2p_{3/2}$ соответствует состоянию электрона с $n = 2$, $l = 1$ и $j = 3/2$. Расщепление уровней за счет спин-орбитального взаимодействия малое и составляет приблизительно $5 \cdot 10^{-5}$ от разности энергий двух уровней, значение главного квантового числа n которых отличается на единицу.

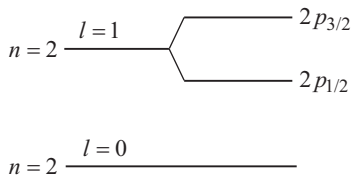


Рис. 41

§ 19. Строение многоэлектронных атомов

Оптические спектры многоэлектронных или, иначе говоря, сложных атомов отличает их насыщенность спектральными линиями. Число линий в спектрах тяжелых атомов достигает нескольких десятков тысяч. При написании уравнения Шредингера для сложных атомов нужно учитывать не только взаимодействие электронов с атомным ядром, но и взаимодействие электронов друг с другом. Теория многоэлектронных атомов выходит далеко за рамки этой книги. Здесь будут изложены только некоторые ее результаты.

Каждый из электронов сложного атома движется в электрическом поле, которое получается от сложения поля ядра и поля остальных электронов. Результирующее поле приблизительно можно считать центральным, но не кулоновским: за счет экранирования ядра электронами потенциал поля убывает быстрее, чем функция $1/r$, где r — расстояние от точки наблюдения до атомного ядра. В центральном поле у каждого электрона сохраняется угловой момент, его состоянию можно приписать те же квантовые числа, что и электрону водородоподобного

атома, например, набор n, l, j, m_j или набор n, l, m_l, m_s и т. д. Выбор квантовых чисел неоднозначен, но их число должно быть равно числу степеней свободы рассматриваемой физической системы. На каждый электрон в атоме приходится четыре степени свободы — три пространственных и одна внутренняя (направление спина). Этим и определяется число независимых квантовых чисел — четыре.

В водородоподобных атомах состояния электронов, которые характеризуются одним и тем же значением n , но различными l , имеют с точностью до спин-орбитального взаимодействия одинаковую энергию (вырождены). В многоэлектронных атомах состояния электронов с одинаковым значением n , но с разными l , обладают существенно различной энергией, разность энергий таких состояний много больше энергии спин-орбитального взаимодействия. Опыт и расчет показывают, что *как правило энергия квантового состояния электрона в многоэлектронном атоме возрастает с увеличением главного квантового числа n , а при фиксированном n — с увеличением азимутального квантового числа l* . Однако если число электронов в атоме велико, это правило нередко нарушается (см. ниже анализ заполнения электронами квантовых состояний в атомах калия ($Z = 19$) и кальция ($Z=20$) в разделе, посвященном периодической таблице Д. И. Менделеева).

Чтобы определить структуру электронной оболочки сложного атома, необходимо указать квантовые состояния всех его электронов. Если в каком-нибудь состоянии с заданными значениями n, l, j находятся несколько электронов, запись можно сделать более компактной. Например, в основном состоянии атома гелия оба электрона находятся в состоянии $1s_{1/2}$. Вместо записи состояний каждого электрона отдельно, а именно: $1s_{1/2}, 1s_{1/2}$, пишут $1s_{1/2}^2$, где правый верхний индекс указывает число электронов в данном состоянии.

Типы связи электронов в сложных атомах. Совокупность всех электронов многоэлектронного атома называют его электронной оболочкой. Полный угловой момент электронной оболочки складывается из орбитальных и спиновых моментов всех его электронов. В атомах легких и средних химических элементов, где спин-орбитальное взаимодействие сравнительно невелико, орбитальные моменты отдельных электронов складываются в суммарный орбитальный момент атома \mathbf{L} , а спиновые моменты отдельных электронов — в суммарный спиновый момент атома \mathbf{S} :

$$\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \mathbf{l}_3 + \dots, \quad (19.1)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3 + \dots \quad (19.2)$$

Полный угловой момент атома \mathbf{j} является суммой \mathbf{L} и \mathbf{S} :

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (19.3)$$

Моментам $\mathbf{L}, \mathbf{S}, \mathbf{J}$ соответствуют квантовые числа L, S, J .

Если полный угловой момент атома определяется соотношениями (19.1)–(19.3), связь электронов в атоме называется *нормальной* или *связью Рассела–Саундерса*. В случае связи Рассела–Саундерса полный угловой момент атома \mathbf{J} сохраняется, квантовое число J является константой движения. При этом константами движения являются также модули векторов \mathbf{L} и \mathbf{S} (их определяют квантовые числа L и S), а также проекции векторов \mathbf{L} и \mathbf{S} на направление вектора \mathbf{J} . Следует представлять себе, что векторы \mathbf{L} и \mathbf{S} , имея постоянную длину, вращаются вокруг вектора \mathbf{J} .

Для описания состояний многоэлектронных атомов используются принятые в спектроскопии обозначения, аналогичные обозначениям состояний для отдельных электронов. В зависимости от значения орбитального квантового числа L состояния атомов обозначаются следующими прописными буквами:

Значение L	0	1	2	3
Обозначение состояния	S	P	D	F

и так далее по алфавиту, за исключением S и P . Справа внизу от прописной буквы латинского алфавита указывается значение квантового числа J , а слева сверху — величина $2S + 1$, называемая *мультиплетностью состояния*.

Мультиплетность состояния с определенным значением L равна, по определению, числу уровней, на которые вследствие спин-орбитального взаимодействия расщепляется энергетический уровень, соответствующий указанному состоянию. Если уровень не расщепляется, состояние называется синглетом, при расщеплении на два уровня — дублетом, при расщеплении на три уровня — триплетом и т. д.

В тех случаях, когда $S \leq L$, число $2S + 1$ равно количеству уровней, появляющихся из-за спин-орбитального взаимодействия, то есть действительно определяет мультиплетность состояния. В том случае, когда $S > L$, число уровней тонкой структуры равно не $2S + 1$, а $2L + 1$ (ср. текст после формулы (17.27)). Однако и в этом случае число $2S + 1$ называется мультиплетностью.

Рассмотрим примеры. Все S -состояния атомов, также как s -состояния отдельных электронов, являются синглетными.

Основным, обладающим наименьшей энергией состоянием атома углерода является состояние, обозначаемое как 3P_0 . Эта запись означает, что атом углерода в основном состоянии имеет квантовые числа $L=1$, $S=1$, $J=0$. Мультиплетность состояния равна $2S + 1=3$, то есть данное состояние является одним из следующих трех близких по энергии состояний с одинаковыми значениями L и S , но различными J : 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 (тонкое расщепление).

Состояние атома, которое характеризуется определенными значениями квантовых чисел L , J и мультиплетностью $2S + 1$, записывается

в виде символа $^{2S+1}L_J$. Этот символ называется *термом*. Примеры обозначений указанного типа рассмотрены выше.

Нормальная связь электронов в атомах не является единственно возможной. В тяжелых атомах из-за сильного спин-орбитального взаимодействия полный угловой момент атома \mathbf{J} складывается из полных угловых моментов \mathbf{j} отдельных электронов:

$$\mathbf{J} = \sum \mathbf{j}_i, \quad \mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i,$$

где i — порядковый номер электрона, суммирование ведется по всем электронам атома. Такая связь электронов в атомах называется *j-j-связью*, она редко реализуется.

Принцип Паули. Электроны в атоме могут находиться в различных квантовых состояниях, описываемых разными наборами квантовых чисел, например, n, l, j, m_j или n, l, m_l, m_s . Можно было бы ожидать, что все электроны сложного атома, находящегося в основном состоянии, будут занимать уровень с наименьшей возможной энергией (наиболее глубокий уровень атома). Однако это не так. По мере увеличения числа электронов в атоме (атомного номера Z) происходит последовательное заполнение электронных уровней, причем каждый следующий электрон занимает самый глубокий из еще не заполненных уровней.

Последовательное заполнение различных электронных уровней происходит в соответствии с так называемым *принципом Паули*, согласно которому *в одном и том же квантовом состоянии не может находиться более одного электрона (или любой другой частицы с полуцелым значением спинового квантового числа s)*.

Частицы с полуцелым спином, на которые распространяется принцип Паули, называются частицами Ферми–Дирака или *фермионами*. Частицы с целым значением спинового квантового числа s называются частицами Бозе–Эйнштейна или *бозонами*. Разделение на фермионы и бозоны справедливо не только для элементарных частиц, но и для составных образований, например, для атомных ядер. Так, α -частицы (ядра атомов гелия), состоящие из двух протонов (спин протона $s = 1/2$) и двух нейтронов (спин нейтрона $s = 1/2$), являются бозонами, принцип Паули на них не распространяется. Сами протоны и нейтроны принадлежат к числу фермионов и подчиняются принципу Паули.

Периодическая система элементов Д. И. Менделеева. Все имеющиеся в природе химические элементы, за исключением водорода, представляют собой многоэлектронные атомы. В периодической системе элементов Д. И. Менделеева (1834–1907) атомы располагаются в порядке возрастания их атомного номера Z , который равен числу электронов в атоме и заряду атомного ядра, выраженному в единицах элементарного заряда. Полное число электронов каждого следующего элемента периодической системы на единицу больше полного числа электронов предыдущего элемента.

Как указывалось выше, квантовое состояние электрона в атоме можно описать любым набором четырех независимых квантовых чисел, например, n , l , m_l , m_s . Согласно принципу Паули в каждом квантовом состоянии может находиться не более одного электрона.

Все квантовые состояния электронов с одинаковым значением главного квантового числа n образуют n -слой *электронной оболочки* атома. Каждому n -слою соответствует $2n^2$ различных квантовых состояний электронов (см. § 14). Слой может быть заполненным или незаполненным в зависимости от того, все или не все состояния в нем заняты электронами. Приняты следующие обозначения слоев: все состояния с $n = 1$ образуют K -слой, с $n = 2$ — L -слой, с $n = 3$ — M -слой, и так далее по алфавиту.

Значение n	1	2	3	4	5	6	7
Обозначение слоя	K	L	M	N	O	P	Q

При фиксированном значении n все электроны с заданным значением орбитального квантового числа l составляют *оболочку данного слоя*, а именно: электроны в s -состоянии ($l = 0$) составляют s -оболочку, в p -состоянии ($l = 1$) — p -оболочку, в d -состоянии ($l = 2$) — d -оболочку и т. д. по алфавиту. В K -слое ($n = 1$) имеется только s -оболочка; в L -слое ($n = 2$) — s - и p -оболочки; в M -слое ($n = 3$) — s -, p - и d -оболочки, и т. д.

Рассмотрим оболочку какого-либо слоя с фиксированными значениями n и l . Напомним, что каждому l соответствует $2l + 1$ различных значений m_l ; а при каждом m_l возможны состояния с $m_s = 1/2$ и $m_s = -1/2$. Таким образом, при заданном значении l существует $2(2l + 1)$ состояний с различными значениями m_l и m_s . Следовательно, независимо от значения n , в s -состоянии могут находиться 2 электрона, в p -состоянии — 6 электронов, в d -состоянии — 10 электронов, и т. д. Все электроны с одинаковыми значениями n и l (то есть все электроны одной и той же оболочки определенного слоя) называются *эквивалентными*.

Атомы системы элементов Д. И. Менделеева группируются в *периоды*: каждый период начинается с заполнения очередной s -оболочки, периоды со второго по шестой заканчиваются заполнением p -оболочек.

Рассмотрим примеры строения электронных оболочек атомов.

Водород. В атоме водорода имеется один электрон, который в невозбужденном атоме находится в состоянии с $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$ и произвольным значением m_s ($+1/2$ или $-1/2$). Основным состоянием атома водорода является терм $^2S_{1/2}$.

Гелий. У атома гелия, который замыкает первый период таблицы Д. И. Менделеева, имеется два электрона ($Z = 2$). Один из них находится в состоянии с $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = 1/2$, второй — в состоянии с $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = -1/2$. Структура электронной оболочки

гелия следующая: $1s_{1/2}^2$. Направленные в противоположные стороны спины электронов при сложении дают нулевой спиновый угловой момент. Поэтому основным состоянием атома гелия является состояние с $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$, $2S + 1 = 1$, то есть терм 1S_0 .

Литий. Второй период таблицы Д. И. Менделеева начинается элементом литием ($Z = 3$). Два электрона в этом атоме находятся в состоянии $1s_{1/2}$, как и в атоме гелия. Третий электрон находится на наиболее глубоком из незанятых энергетическом уровне в состоянии $2s$. Конфигурация электронной оболочки лития имеет вид: $1s_{1/2}^2 2s_{1/2}$. Суммарные квантовые числа L , S и J уже заполненного K -слоя (как и для любого заполненного слоя или заполненной оболочки слоя) равны нулю. Поэтому состояние атома в целом определяется состоянием третьего электрона, который находится в незаполненном L -слое. Основным состоянием атома лития является $2^2S_{1/2}$ (здесь перед обозначением атомного терма указано значение главного квантового числа $n = 2$ единственного электрона, имеющегося сверх заполненной s -оболочки K -слоя, обычно так поступают при записи термов основного состояния атомов щелочных элементов).

Здесь еще раз отдельно подчеркнем, что квантовые числа L , S и J любого заполненного слоя или любой заполненной оболочки слоя равны нулю. Поэтому значения L , S и J атома в целом определяются электронами частично заполненной оболочки, если таковая в атоме имеется.

Бериллий. В атоме бериллия ($Z = 4$) два электрона K -слоя повторяют конфигурацию гелия, два других электрона находятся в состоянии $2s_{1/2}$ с взаимно противоположным направлением спинов: $1s_{1/2}^2 2s_{1/2}^2$. Основным состоянием является состояние с $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$: 1S_0 .

Бор. Атом бора имеет пять электронов ($Z = 5$). В атоме бериллия полностью заполнены K -слой и $2s$ -оболочка в L -слое. В атоме бора на один электрон больше, чем в бериллии. Этот электрон занимает одно из состояний в $2p$ -оболочке: состояние $2p_{1/2}$. Структура электронной оболочки бора имеет вид: $1s_{1/2}^2 2s_{1/2}^2 2p_{1/2}$. Основным состоянием атома является терм $^2P_{1/2}$; здесь $L = 1$, $S = 1/2$, $J = 1/2$, $2S + 1 = 2$. Таким образом, в основном состоянии атома бора реализуется значение $J = L - S = 1/2$, которое подтверждается опытом, а также вытекает из эмпирических правил (см. ниже). Возможное в принципе состояние с $J = L + S = 3/2$ не реализуется.

Углерод. В атоме углерода шесть электронов ($Z = 6$). В нем полностью заполнены K -слой и $2s$ -оболочка L -слоя. В $2p$ -оболочке L -слоя имеется только два электрона. Какими именно значениями квантовых числе m_l и m_s характеризуются два p -электрона углерода заранее сказать нельзя, поскольку используемая нами схема заполнения электронных уровней является приближительной и не учитывает взаимодействие электронов сложных атомов друг с другом. Конфигурация электронной

оболочки атомов в основном состоянии устанавливается с помощью эмпирических правил Хунда.

Содержание правил Хунда заключается в следующем. *Наименьшей энергией обладает состояние с наибольшим возможным значением S и с наибольшим возможным при таком S значением L . При этом если электронами заполнено не более половины квантовых состояний оболочки, то число J равно $|L - S|$, в противном случае J равно $L + S$.*

Правила Хунда определяют поведение электронов, принадлежащих к одной и той же заполняемой оболочке, то есть состояние эквивалентных электронов. Если в атоме имеются заполненные оболочки и слои, которые обладают нулевыми суммарными квантовыми числами L, S, J , а также имеется незаполненная оболочка, то правила Хунда, применяемые для незаполненной оболочки, определяют суммарное состояние электронов всего атома.

Если в атоме имеются две незаполненные оболочки, то сначала по правилу Хунда определяются суммарные квантовые числа электронов каждой незаполненной оболочки, а затем рассчитываются квантовые числа L, S, J всего атома. При этом уже полученные квантовые числа двух незаполненных оболочек вновь складываются с помощью правил Хунда.

В атоме углерода электронами заняты два из шести $2p$ -состояний. Наибольшее значение суммарного спина двух электронов равно единице: $S = 1$ (спины электронов параллельны друг другу). Состояние атома с суммарным орбитальным моментом $L = 2$ (орбитальные моменты электронов параллельны друг другу) запрещено принципом Паули, так как в этом случае оба $2p$ -электрона находятся в одном и том же квантовом состоянии. При $S = 1$ наибольшее возможное значение L равно единице. Поскольку $2p$ -оболочка углерода заполнена менее чем наполовину, число J должно быть равно нулю: $J = |L - S| = 0$. Таким образом, основным состоянием атома углерода является: 3P_0 .

В табл. 5.1 показаны электронные структуры атомов нескольких периодов таблицы Д. И. Менделеева.

Как видно из таблицы, энергия электрона в атоме не всегда монотонно возрастает с увеличением квантовых чисел n и l . У атома аргона ($Z = 18$) заполнены K -и L -слои, в M -слое заполнены только $3s$ - и $3p$ -оболочки, а $3d$ -оболочка свободна. Можно было бы ожидать, что в атоме калия (следующий элемент таблицы, $Z = 19$) начнет заполняться $3d$ -оболочка. На самом деле у калия, а затем у кальция ($Z = 20$) заполняется $4s$ -оболочка, то есть s -оболочка следующего по порядку слоя при незаполненной d -оболочке предыдущего.

Причиной отклонения от монотонности возрастания энергии состояния по мере увеличения порядкового номера электронного слоя является экранирование ядра электронами, в результате которого электрическое поле быстро убывает с увеличением расстояния до центра атома. Электроны s -оболочек, симметричные волновые функции которых

Таблица 5.1

Электронные структуры атомов

Элемент	Основное состояние	Количество электронов в слоях и оболочках												
		<i>K</i>	<i>L</i>			<i>M</i>			<i>N</i>				<i>O</i>	
		1s	2s	2p	2s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d
${}^1_1\text{H}$	${}^2S_{1/2}$	1												
${}^2_2\text{He}$	1S_0	2												
${}^3_3\text{Li}$	${}^2S_{1/2}$	2	1											
${}^4_4\text{Be}$	1S_0	2	2											
${}^5_5\text{B}$	${}^2P_{1/2}$	2	2	1										
${}^6_6\text{C}$	3P_0	2	2	2										
${}^7_7\text{N}$	${}^4S_{3/2}$	2	2	3										
${}^8_8\text{O}$	3P_2	2	2	4										
${}^9_9\text{F}$	${}^2P_{3/2}$	2	2	5										
${}^{10}_{10}\text{Ne}$	1S_0	2	2	6										
${}^{11}_{11}\text{Na}$	${}^2S_{1/2}$	"	"	"	1									
${}^{12}_{12}\text{Mg}$	1S_0	"	"	"	2									
${}^{13}_{13}\text{Al}$	${}^2P_{1/2}$	"	"	"	2	1								
${}^{14}_{14}\text{Si}$	3P_0	"	"	"	2	2								
${}^{15}_{15}\text{P}$	${}^4S_{3/2}$	"	"	"	2	3								
${}^{16}_{16}\text{S}$	3P_2	"	"	"	2	4								
${}^{17}_{17}\text{Cl}$	${}^2P_{3/2}$	"	"	"	2	5								
${}^{18}_{18}\text{Ar}$	1S_0	"	"	"	2	6								
${}^{19}_{19}\text{K}$	${}^2S_{1/2}$	"	"	"	"	"		1						
${}^{20}_{20}\text{Ca}$	1S_0	"	"	"	"	"		2						
${}^{21}_{21}\text{Sc}$	${}^2D_{3/2}$	"	"	"	"	"	1	2						
${}^{22}_{22}\text{Ti}$	3F_2	"	"	"	"	"	2	2						
${}^{23}_{23}\text{V}$	${}^4F_{3/2}$	"	"	"	"	"	3	2						
${}^{24}_{24}\text{Cr}$	7S_3	"	"	"	"	"	5	1						
${}^{25}_{25}\text{Mn}$	${}^6S_{5/2}$	"	"	"	"	"	5	2						
${}^{26}_{26}\text{Fe}$	5D_4	"	"	"	"	"	6	2						
${}^{27}_{27}\text{Co}$	${}^4F_{9/2}$	"	"	"	"	"	7	2						
${}^{28}_{28}\text{Ni}$	3F_4	"	"	"	"	"	8	2						
${}^{29}_{29}\text{Cu}$	${}^2S_{1/2}$	"	"	"	"	"	10	1						
${}^{30}_{30}\text{Zn}$	1S_0	"	"	"	"	"	10	2						
${}^{31}_{31}\text{Ga}$	${}^2P_{1/2}$	"	"	"	"	"	10	2	1					
${}^{32}_{32}\text{Ge}$	3P_0	"	"	"	"	"	10	2	2					
${}^{33}_{33}\text{As}$	${}^4S_{3/2}$	"	"	"	"	"	10	2	3					
${}^{34}_{34}\text{Se}$	3P_2	"	"	"	"	"	10	2	4					
${}^{35}_{35}\text{Br}$	${}^2P_{3/2}$	"	"	"	"	"	10	2	5					
${}^{36}_{36}\text{Kr}$	1S_0	"	"	"	"	"	10	2	6					

главным образом сосредоточены в центральной части атома, испытывают большее воздействие со стороны электрического поля ядра и, соответственно, характеризуются большей «энергией связи» с ядром, чем электроны оболочек p , d и т. д., волновые функции которых сильно делокализованы, отличны от нуля там, где электрическое поле ядра уже очень мало.

Символ, в котором указываются слои, оболочки и числа электронов в каждой оболочке, называется *электронной конфигурацией* атома. Например, символ $1s^2 2s^2 2p^6$ означает, что в состоянии с $n = 1$, $l = 0$ находятся два электрона, в состоянии с $n = 2$, $l = 0$ — также два электрона, в состоянии с $n = 2$, $l = 1$ — шесть электронов. Это — электронная конфигурация неона. Поскольку в многоэлектронных атомах энергия состояния зависит в основном от значений двух квантовых чисел — главного n и азимутального l , символ электронной конфигурации атома является компактным и удобным способом описания его структуры.

Правила отбора при излучении атомов. В атоме, находящемся в основном состоянии, электроны занимают самые глубокие энергетические уровни. У возбужденного атома один или несколько электронов находятся на более высоких уровнях, а некоторые нижние уровни остаются незаполненными. Если при переходе электронов с верхних на нижние незанятые уровни энергия выделяется в виде электромагнитного излучения, наблюдаются оптические или рентгеновские спектры (последние возникают при переходах внутренних электронов атома).

Правила отбора определяют возможные изменения квантовых характеристик атома (квантовых чисел) при испускании электромагнитной волны. Эти правила являются следствиями законов сохранения, в частности, закона сохранения углового момента. Они позволяют определить, переходы между какими энергетическими уровнями в оптике возможны, а между какими — запрещены.

Исследование взаимодействия атомов с электромагнитным полем показывает, что *фотон обладает собственным угловым моментом (спином), равным единице* (в единицах \hbar). Из поперечности электромагнитной волны вытекает, что у фотона возможны только две проекции спина на направление его движения: -1 и $+1$.

При испускании фотона изменение углового момента атома \mathbf{J} равно моменту, уносимому фотоном. В связи с этим возникает следующее правило отбора при излучении для квантового числа J :

$$\begin{aligned}\Delta J &= \pm 1, 0 \text{ при } J_{\text{нач}} \neq 0, J_{\text{кон}} \neq 0; \\ \Delta J &= \pm 1 \text{ при } J_{\text{нач}} = 0 \text{ или } J_{\text{кон}} = 0.\end{aligned}$$

Заметим, что если полный угловой момент атома до и после испускания света отличен от нуля ($J_{\text{нач}} \neq 0$, $J_{\text{кон}} \neq 0$), в результате испускания фотона вектор \mathbf{J} может изменить свое направление в пространстве, не меняясь по величине; этому соответствует $\Delta J = 0$. Если полный

угловой момент атома до или после испускания света равен нулю ($J_{\text{нач}} = 0$ или $J_{\text{кон}} = 0$), то в случае $\Delta J = 0$ не выполнялся бы закон сохранения углового момента; такая ситуация невозможна.

Для квантового числа m_J проекции полного углового момента атома правило отбора определяется аналогично:

$$\Delta m_J = \pm 1, 0.$$

При испускании фотонов оптического диапазона вектор спинового углового момента атома \mathbf{S} не претерпевает изменений, то есть:

$$\Delta S = 0.$$

Учитывая, что полный угловой момент атома \mathbf{J} равен сумме его орбитального \mathbf{L} и спинового \mathbf{S} моментов, правила отбора по J и S определяют правило отбора по орбитальному квантовому числу атома L и его проекции m_L :

$$\begin{aligned} \Delta L &= 0, \pm 1 \text{ при } L_{\text{нач}} \neq 0, \quad L_{\text{кон}} \neq 0; \\ \Delta L &= \pm 1 \text{ при } L_{\text{нач}} = 0 \text{ или } L_{\text{кон}} = 0; \\ \Delta m_L &= 0, \pm 1. \end{aligned}$$

Можно показать, что для атомов, в которых испускание света связано с изменением состояния только одного электрона (атом водорода, водородоподобные атомы, а также атомы с одним электроном сверх заполненных оболочек) запрещены переходы с $\Delta L = 0$. Если переход атома из одного состояния в другое не связан с поглощением или испусканием электромагнитной волны, то правила отбора иные или вообще отсутствуют.

Задачи

5.1. Найти с учетом движения ядра атома водорода выражения для энергии связи электрона в основном состоянии и для постоянной Ридберга. На сколько процентов отличаются энергия связи и постоянная Ридберга, полученные без учета движения ядра, от соответствующих уточненных значений этих величин?

5.2. Найти для атомов легкого и тяжелого водорода (H и D) разность: а) энергий связи их электронов в основном состоянии; б) длин волн головных линий серии Лаймана.

5.3. Найти средний электростатический потенциал, создаваемый электроном в центре атома водорода, если электрон находится в основном состоянии, для которого волновая функция $\psi(r) = A \exp(-r/r_1)$, где A — некоторая постоянная, r_1 — первый боровский радиус (константа).

5.4. Волновая функция электрона в основном состоянии атома водорода имеет вид $\psi(r) = A \exp(-r/r_1)$, где A — некоторая постоянная, r_1 — первый боровский радиус (константа). Найти:

а) наиболее вероятное расстояние между электроном и ядром;
б) среднее значение модуля кулоновской силы, действующей на электрон;

в) среднее значение потенциальной энергии электрона в поле ядра.

5.5. Выписать спектральные обозначения термов атома водорода, электрон которого находится в состоянии с главным квантовым числом $n = 3$.

5.6. Найти возможные значения полных механических моментов атомов, находящихся в состояниях 4P и 5D .

5.7. Атом находится в состоянии, мультиплетность которого равна трем, а полный механический момент $\hbar\sqrt{20}$. Каким может быть соответствующее квантовое число L ?

5.8. Найти возможные мультиплетности x термов типа: а) ${}^x D_2$; б) ${}^x P_{3/2}$; в) ${}^x F_1$.

5.9. Вычислить фактор Ланде для атомов: а) в S -состояниях; б) в синглетных состояниях.

5.10. Вычислить фактор Ланде для следующих термов: а) ${}^6 F_{1/2}$; б) ${}^4 D_{1/2}$; в) ${}^5 F_2$; г) ${}^5 P_1$; д) ${}^3 P_0$.

5.11. Найти с помощью правил Хунда магнитный момент основного состояния атома, незамкнутая подболочка которого заполнена ровно наполовину пятью электронами.

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ

§ 20. Распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака

К так называемым *фермионам* — частицам, которые подчиняются принципу Паули и описываются статистикой Ферми–Дирака (см. ниже), относятся все элементарные частицы с полуцелым спиновым квантовым числом s : электроны, протоны, нейтрино и др.

К так называемым *бозонам* — частицам, которые не подчиняются принципу Паули и описываются статистикой Бозе–Эйнштейна (см. ниже), относятся все элементарные частицы с нулевым или целым спиновым квантовым числом s : фотоны, π - и K -мезоны и др.

Разделение микрообъектов на фермионы и бозоны справедливо не только для элементарных частиц, но и для сложных образований, например, для атомных ядер и для самих атомов. Свойствами бозонов обладают системы, состоящие из бозонов или четного числа фермионов. Свойствами фермионов обладают системы, состоящие из нечетного числа фермионов. Например, α -частицы (ядра атома гелия), состоящие из двух протонов (спин протона $1/2$) и двух нейтронов (спин нейтрона также $1/2$), являются бозонами, принцип Паули на них не распространяется.

Статистический вес. В главах IV и V было показано, что в тех случаях, когда движение частицы в пространстве ограничено (частица в потенциальной яме, электрон в поле атомного ядра, гармонический осциллятор и др.), существует дискретный набор возможных значений ее энергии — так называемые энергетические уровни. Каждому квантовому состоянию соответствует определенная энергия. За исключением тех случаев, когда имеет место вырождение уровней, разным квантовым состояниям отвечают разные значения энергии. Будем считать на протяжении данной главы, что все рассматриваемые энергетические уровни не вырождены.

Взаимное расположение энергетических уровней, их густота (количество уровней, приходящихся на энергетический интервал фиксированной ширины) определяются свойствами конкретной физической системы. Так, в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками энергия частицы $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$ пропорциональна квадрату квантового числа n (см. (9.7)), с увеличением n расстояние между соседними уровнями возрастает (рис. 42).

В водородоподобном атоме энергия состояния $E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2}$ обратно пропорциональна квадрату главного квантового числа n

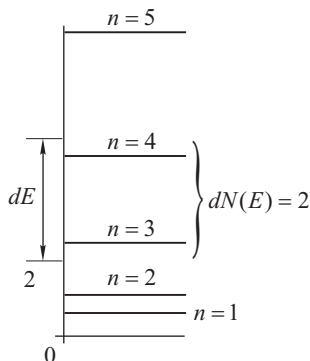


Рис. 42

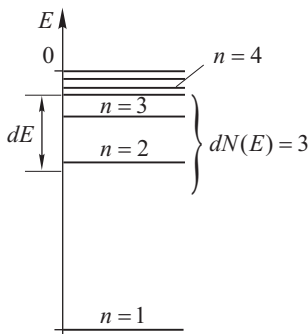


Рис. 43

(см. (14.4)); с увеличением n расстояние между соседними уровнями уменьшается, их густота растет (рис. 43).

Энергетические уровни гармонического осциллятора $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ являются эквидистантными (см. (12.3)), они расположены на одинаковом расстоянии друг от друга (рис. 44).

Для описания взаимного расположения энергетических уровней вводится понятие статистического веса, которое служит количественной характеристикой густоты уровней. Пусть dE — ширина бесконечно малого энергетического интервала вблизи энергии E (от E до $E + dE$), $dN(E)$ — число энергетических уровней (квантовых состояний физической системы), приходящихся на интервал dE . *Статистическим весом* называется величина, равная:

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE}. \quad (20.1)$$

Физический смысл понятия статистического веса состоит в том, что величина $g(E)$ равна числу квантовых состояний, отнесенному к единичному интервалу энергии системы. Чем больше статистический вес, тем ближе друг к другу (гуще) расположены уровни. Статистический вес является функцией энергии E .

Величины $dN(E)$ и dE показаны на схемах расположения энергетических уровней некоторых физических систем на рисунках 42–44.

Предположим, что имеется физическая система, в состав которой входит не одна, а много частиц, например, в потенциальной яме с

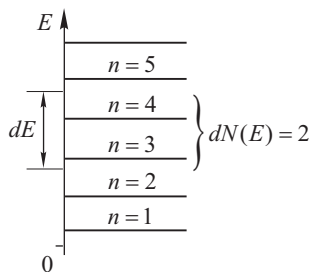


Рис. 44

бесконечно высокими стенками имеются взаимодействующие друг с другом частицы в количестве, сравнимом по порядку величины с числом Авогадро. Такая система представляет собой газ частиц, в котором действуют статистические закономерности (статистический ансамбль). Из курса молекулярной физики известны формулы классической статистики — распределение молекул идеального газа по скоростям (распределение Максвелла):

$$f(V_x, V_y, V_z) = \left(\frac{m}{2\pi\kappa T} \right)^{3/2} e^{-E_{\text{кин}}/(\kappa T)},$$

где V_x, V_y, V_z — компоненты скорости, m — масса молекул, T — абсолютная температура, κ — постоянная Больцмана, $E_{\text{кин}}$ — кинетическая энергия молекул; распределение молекул по координатам:

$$n(x, y, z) = n_0 e^{-E_{\text{пот}}(x, y, z)/(\kappa T)},$$

где $E_{\text{пот}}(x, y, z)$ — зависящая от координат потенциальная энергия молекул; $n(x, y, z)$ — концентрация молекул вблизи точки пространства с координатами x, y, z ; n_0 — концентрация молекул в той области пространства, где их потенциальная энергия принята равной нулю.

Квантовая теория показывает, что формулы статистических распределений классической физики должны быть изменены. При выводе классических формул предполагается, что частицы одного и того же сорта можно отличить друг от друга, и, следовательно, перенумеровать, присвоив каждой свой порядковый номер. Тогда состояния физической системы, при которых первая частица находится в положении A , а вторая — в положении B , и наоборот, являются двумя разными состояниями. В квантовой физике частицы одного сорта ничем не отличаются друг от друга, и установить, какая из них является первой, а какая второй, невозможно. Поэтому указанные состояния физической системы должны рассматриваться как одно и то же состояние. Квантовая физика и классическая физика приводят к разным формулам для расчета вероятности состояний, к разным статистическим распределениям. В квантовой физике частицы с целым спином (0, 1, 2, ...) подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна, частицы с полуцелым спином (1/2, 3/2, ...) — статистике Ферми–Дирака. Распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака позволяют ответить на вопрос, сколько в среднем частиц из всех имеющихся в статистическом ансамбле, находятся в состоянии с определенным значением энергии E . Приведем формулы статистических распределений квантовой физики без вывода.

Распределение Бозе–Эйнштейна для статистического ансамбля частиц с нулевой массой покоя. Кванты электромагнитного излучения — фотоны — имеют нулевую массу покоя. Они характеризуются значением спинового квантового числа $s = 1$ и лишь двумя возможными значениями проекции спина на направление светового луча $+1$ и -1 . Наличие только двух проекций спина на заданное направление

связано с поперечностью электромагнитной волны и существованием двух типов круговой поляризации — правой и левой. Таким образом, фотоны являются бозонами с нулевой массой покоя.

Пусть в замкнутой области пространства объема V (в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками) имеется равновесный газ фотонов при температуре T . Рассматриваемая потенциальная яма — это, например, ящик в форме прямоугольного параллелепипеда с абсолютно отражающими зеркальными стенками. При заданной температуре T количество фотонов в ящике фиксировано. При изменении температуры полное число фотонов меняется. Можно показать, что в этих условиях среднее число частиц (фотонов) в квантовом состоянии с энергией E (так называемое среднее *число заполнения* энергетического уровня E), которое обозначим через $n_{\text{фот}}$, зависит только от величины E и температуры T газа и определяется формулой:

$$n_{\text{фот}} = \frac{1}{e^{E/(\kappa T)} - 1}, \quad (20.2)$$

где κ — постоянная Больцмана.

Функция (17.2) называется *распределением Бозе–Эйнштейна* по энергиям частиц с нулевой массой покоя. График этой монотонно убывающей функции энергии E при некотором фиксированном значении температуры T представлен на рис. 45. С увеличением энергии E квантового состояния среднее число частиц $n_{\text{фот}}$ в данном состоянии экспоненциально уменьшается.

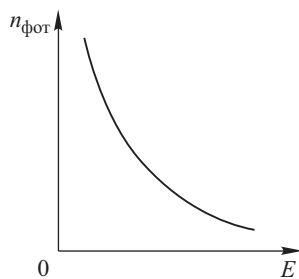


Рис. 45

Распределение Бозе–Эйнштейна для статистического ансамбля частиц с отличной от нуля массой покоя. Рассмотрим находящийся в некоторой замкнутой области пространства объемом V (потенциальной яме с бесконечно высокими стенками) равновесный газ бозонов при температуре T . Масса покоя частиц, из которых состоит газ, отлична от нуля. Полное число частиц газа N_0 в объеме V является постоянной величиной. Можно показать, что среднее число частиц $n_{\text{боз}}$ в каждом квантовом состоянии с энергией E (среднее число заполнения энергетического уровня E) определяется выражением:

$$n_{\text{боз}} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} - 1}, \quad (20.3)$$

где μ — так называемый *химический потенциал* газа, который зависит от числа частиц N_0 , температуры T и объема V . Формула (20.3) выражает *распределение Бозе–Эйнштейна* для частиц с отличной от нуля массой покоя.

Химический потенциал μ — это термодинамический потенциал Гиббса в расчете на одну частицу газа (см. в кн. 2 «Молекулярная

физика и термодинамика», § 20). Величина μ определяется с помощью интегрального уравнения:

$$N_0 = \int_0^{\infty} n_{\text{боз}}(E, \mu) g(E) dE,$$

или:

$$N_0 = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} - 1} g(E) dE. \quad (20.4)$$

Здесь $g(E)dE$ — число квантовых состояний, приходящихся на интервал энергии $(E, E + dE)$; произведение $n_{\text{боз}}(E, \mu)g(E)dE$ дает число частиц с энергией в указанном интервале dE ; интегрирование по всем возможным значениям энергии от нуля до $+\infty$ позволяет вычислить полное число частиц газа N_0 . Для расчета μ с помощью (20.4) необходимо знать статистический вес $g(E)$ конкретной физической системы (см. § 21).

Поскольку средние числа заполнения энергетических уровней $n_{\text{боз}}$ по своему смыслу не могут быть отрицательными, из выражения (20.3) следует, что $\mu \leq E$. Если энергию E основного состояния частицы (самый глубокий энергетический уровень в потенциальной яме) считать

равной нулю, то $\mu \leq 0$. Таким образом, для бозе-газа химический потенциал отрицателен или равен нулю. Легко показать, что при $T = 0$ химический потенциал μ обращается в нуль. Действительно, если предположить противное ($\mu < 0$), то при $T = 0$ из (20.3) следовало бы, что в основном состоянии ($E = 0$) среднее число частиц равно нулю, что не соответствует действительности (при стремлении температуры системы к абсолютному нулю все частицы переходят в основное состояние).

График функции (20.3) представлен на рис. 46. Среднее число частиц $n_{\text{боз}}(E)$ в квантовом состоянии с энергией E с увеличением энергии быстро уменьшается.

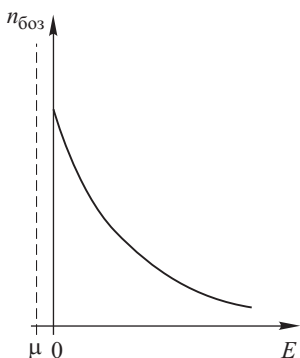


Рис. 46

Распределение Ферми–Дирака. Пусть в некоторой замкнутой области пространства объемом V (потенциальной яме с бесконечно высокими стенками) имеется газ фермионов с общим числом частиц N_0 в равновесном состоянии при температуре T . Частицы газа имеют отличную от нуля массу покоя. Можно показать, что среднее число частиц $n_{\text{ферм}}$ в каждом квантовом состоянии с энергией E (среднее число заполнения энергетического уровня E) определяется выражением:

$$n_{\text{ферм}} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} + 1} = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(\kappa T)} + 1}, \quad (20.5)$$

где $\mu \equiv E_F$ — химический потенциал газа (величина, зависящая от N_0 , T и V), который в случае статистической системы фермионов называется *энергией Ферми*. Функция (20.5) представляет собой *распределение Ферми–Дирака*.

Химический потенциал μ определяется из интегрального уравнения, аналогичного (20.4):

$$N_0 = \int_0^{\infty} n_{\text{ферм}}(E, \mu) g(E) dE,$$

или:

$$N_0 = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} + 1} g(E) dE. \quad (20.6)$$

Чтобы определить μ с помощью (20.6), необходимо знать статистический вес $g(E)$ рассматриваемой конкретной физической системы (см. § 21). В случае газа фермионов ограничения на знак величины μ не накладываются.

График функции (20.5) представлен на рис. 47. Как и в любом статистическом распределении частиц по энергиям, с увеличением энергии E квантового состояния среднее число частиц в этом состоянии уменьшается. Особенности распределения Ферми–Дирака заключаются в следующем.

1. Из формулы (20.5) следует, что всегда $n_{\text{ферм}} < 1$, то есть среднее число частиц в любом квантовом состоянии не превышает единицу. Это согласуется с принципом Паули, согласно которому в каждом квантовом состоянии может находиться не более одной частицы с полуцелым спином.

2. В состояниях с энергией $E < E_F$ среднее число частиц близко к единице ($n_{\text{ферм}} \approx 1$; состояния практически заполнены); в состояниях с $E > E_F$ среднее число частиц мало ($n_{\text{ферм}} \approx 0$; состояния практически свободны). Состояния с энергией, равной энергии Ферми, $E = E_F$, заполнены в среднем наполовину: $n_{\text{ферм}} \approx 0,5$. Переходная область от почти заполненных к почти свободным квантовым состояниям имеет ширину порядка κT с серединой при $E = E_F$.

При приближении температуры T газа к абсолютному нулю указанная переходная область шириной порядка κT сужается, при этом график функции (20.5) по своей форме становится близким к прямоугольной ступеньке (см. кривую, соответствующую температуре T_1 , на рис. 48).

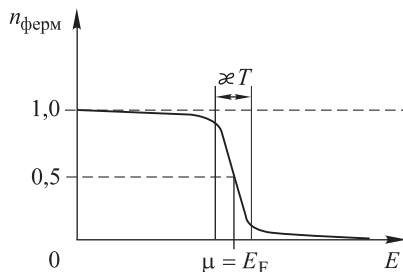


Рис. 47

Если среднее число заполнения энергетических уровней $n_{\text{боз}}$ (20.3) и $n_{\text{ферм}}$ (20.5) много меньше единицы, то в знаменателях указанных формул можно пренебречь единицами по сравнению с экспонентой, и обе формулы переходят в формулу распределения Больцмана:

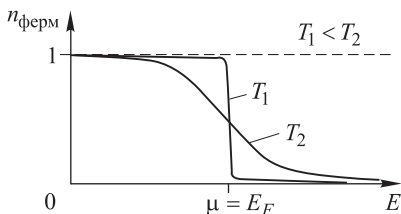


Рис. 48

$$n_{\text{ср}} = e^{(\mu - E)/(\kappa T)} = \text{const} \cdot e^{-E/(\kappa T)}. \quad (20.7)$$

Переход статистик Бозе–Эйнштейна (20.3) и Ферми–Дирака (20.5) в статистику Больцмана происходит при больших значениях величины $(E - \mu)/(\kappa T)$, стоящей в показателе экспоненты. Для газов, подчиняющихся статистике Больцмана (как и для бозе-газов) химический потенциал $\mu < 0$. Это следует из (20.7), если учесть, что для всех квантовых состояний (любых значений E) $n_{\text{ср}} \ll 1$. В частности, это условие должно выполняться для основного состояния, в котором $E = 0$:

$$n_{\text{ср}} = e^{\mu/(\kappa T)} \ll 1.$$

Отсюда $\mu < 0$.

§ 21. Статистический вес

Представим себе, что имеется ящик в форме прямоугольного параллелепипеда с длиной ребер A , B , C . Стенки ящика — зеркальные идеально отражающие поверхности. Поместим внутрь электромагнитное излучение. Рассматриваемая физическая система представляет собой фотонный газ в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (рис. 49). Запертые в ящике фотоны не могут уходить на бесконечность. Следовательно, их энергия квантуется. Движущиеся с релятивистской скоростью частицы не подчиняются уравнению Шредингера. Волновые функции и возможные значения энергии фотонов в стационарных состояниях найдем, не решая каких-либо уравнений.

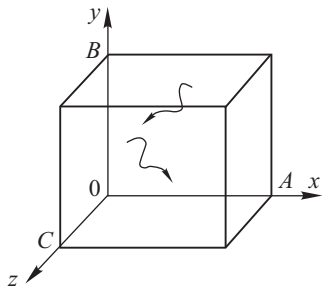


Рис. 49

Итак, необходимо сделать следующее.

1. Найти физическую модель, которая описывает стационарные состояния фотонов в зеркальном ящике.
2. Определить волновые функции стационарных состояний.

3. Определить возможные значения энергии фотонов в стационарных состояниях (энергетические уровни).
4. Вычислить статистический вес $g(E)$ — количественную характеристику плотности расположения уровней на энергетической шкале.

Стационарные состояния фотонов в зеркальном ящике. Как известно (см. § 5), волновой функцией фотона является уравнение бегущей электромагнитной волны. Если фотон поместить в ящик с зеркальными стенками, возникает стационарное состояние, то есть состояние с фиксированным значением энергии частицы. Стационарные состояния, соответствующие определенным уровням энергии фотона в ящике, описываются стоячими волнами. Действительно, поскольку средний по времени поток энергии, переносимой стоячей волной через произвольную поверхность, равен нулю, энергия электромагнитного поля в форме стоячей волны постоянна (фиксирована).

Волновая функция стационарного состояния. Поскольку стационарным состоянием фотона в зеркальном ящике является стоячая электромагнитная волна, то волновая функция стационарного состояния — это уравнение стоячей волны. Стоячие волны в прямоугольном ящике могут быть представлены в виде разложения по волнам, зависящим от каждой из координат x , y и z :

$$\psi(x, y, z) = \psi_0 \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z), \quad (21.1)$$

где k_x , k_y , k_z — проекции на координатные оси волнового вектора \mathbf{k} . При изучении стационарных состояний фотонов зависимость волновой функции от времени, которая описывается множителем $e^{-(i/\hbar)Et} = e^{-i\omega t}$, нас интересовать не будет, поэтому в уравнении (21.1) временной множитель опущен (его можно считать включенным в ψ_0).

Итак, установлен вид волновой функции (21.1) стационарного состояния фотона в трехмерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, которая представляет собой уравнение стоячей электромагнитной волны.

Собственные значения энергии. Возможные значения энергии фотона (уровни энергии) в зеркальном ящике как всегда определим из условий, которые накладываются на волновую функцию частицы. В данном случае достаточно потребовать выполнения условия непрерывности волновой функции на стенках потенциальной ямы. Поскольку за пределы ямы фотон выйти не может, на ее границах волновая функция (21.1) должна обращаться в нуль.

Это условие для стенок ящика, перпендикулярных к координатной оси x (см. рис. 45), имеет вид

$$\psi(x, y, z)_{x=0} = \psi(x, y, z)_{x=A} = 0.$$

Первое равенство для функции (21.1) уже выполнено, а из второго следует:

$$\begin{aligned}\sin k_x A &= 0, \\ k_x &= \frac{n\pi}{A},\end{aligned}\quad (21.2)$$

где $n = 1, 2, \dots$ — целое число.

Аналогично, из условий обращения в нуль волновой функции на стенках ящика, перпендикулярных к координатным осям y и z , следует:

$$\begin{aligned}\sin k_y B &= 0, \\ k_y &= \frac{m\pi}{B},\end{aligned}\quad (21.3)$$

где $m = 1, 2, \dots$ — целое число;

$$\begin{aligned}\sin k_z C &= 0, \\ k_z &= \frac{l\pi}{C},\end{aligned}\quad (21.4)$$

где $l = 1, 2, \dots$ — целое число.

Формулы (21.2)–(21.4) позволяют вычислить зависящие от целочисленных параметров n, m, l проекции k_x, k_y, k_z волнового вектора \mathbf{k} электромагнитной волны, соответствующей стационарному состоянию фотона в яме.

Найдем с помощью формул (21.2)–(21.4) энергию стационарного состояния фотона. Для этого воспользуемся выражением для энергии светового кванта и соотношением, связывающим частоту ω электромагнитной волны и волновое число k :

$$E = \hbar\omega = \hbar ck,$$

где c — скорость электромагнитной волны в вакууме, k — волновое число, $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$. Подставив k_x, k_y, k_z из (21.2)–(21.4), получим:

$$E = \hbar c \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \hbar c \sqrt{\left(\frac{n\pi}{A}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{B}\right)^2 + \left(\frac{l\pi}{C}\right)^2}, \quad (21.5)$$

где параметры n, m, l принимают целочисленные значения.

Итак, энергия фотона в зеркальном ящике имеет дискретный набор возможных значений, вычисляемых по формуле (21.5).

Число квантовых состояний. Статистический вес. Статистический вес $g(E)$, который количественно характеризует плотность расположения уровней на энергетической шкале, равен числу квантовых состояний физической системы, отнесенному к единичному интервалу значений ее энергии. Для расчета статистического веса необходимо

$dN(E)$ — число квантовых состояний, приходящихся на интервал значений энергии $(E, E + dE)$, разделить на ширину dE этого интервала:

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE}.$$

Представим возможные квантовые состояния фотона в зеркальном ящике в виде точек в пространствах волновых чисел, импульсов или в так называемом фазовом пространстве.

Пространство волновых чисел — это пространство, по осям декартовой прямоугольной системы координат которого откладываются проекции k_x, k_y, k_z волнового вектора \mathbf{k} электромагнитной волны.

В *пространстве импульсов* по осям декартовой прямоугольной системы координат откладываются проекции p_x, p_y, p_z импульса \mathbf{p} фотона.

Фазовым пространством называется шестимерное пространство, в котором по осям декартовой прямоугольной (точнее, ортогональной) системы координат отложены координаты x, y, z и проекции p_x, p_y, p_z импульса частицы.

Как было показано выше, каждому стационарному квантовому состоянию фотона в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками — зеркальном ящике с ребрами длиной A, B и C — соответствует волновой вектор \mathbf{k} электромагнитной волны с проекциями $k_x = n\pi/A$, $k_y = m\pi/B$, $k_z = l\pi/C$, где n, m, l — целые числа. Такое квантовое состояние можно изобразить в пространстве волновых чисел точкой с координатами $(n\pi/A, m\pi/B, l\pi/C)$ или в пространстве импульсов точкой с координатами $(p_x = \hbar k_x, p_y = \hbar k_y, p_z = \hbar k_z)$.

На рис. 50 несколько стационарных состояний фотона изображены в виде точек в пространстве волновых чисел. Чтобы не усложнять рисунок, показаны только точки в плоскости $k_x k_y$ ($k_z = 0$).

Квантовое состояние фотона, которое изображается в пространстве волновых чисел точкой с координатами (k_x, k_y, k_z) , представляет собой стоячую волну. Всякую стоячую волну можно рассматривать как суперпозицию двух бегущих навстречу друг другу электромагнитных волн, волновые векторы которых \mathbf{k} и $(-\mathbf{k})$ равны по величине и противоположны по направлению. Проекции векторов \mathbf{k} и $(-\mathbf{k})$ на соответствующие координатные оси

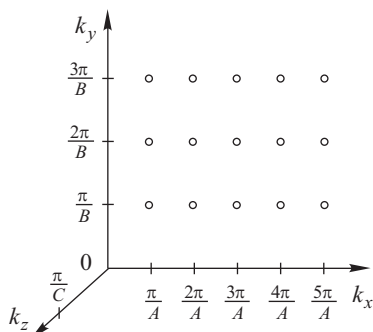


Рис. 50

равны по модулю и имеют противоположные знаки. Учитывая это, можно утверждать, что любая точка пространства волновых чисел, полученная из точки с координатами (k_x, k_y, k_z) путем изменения зна-

ка одной или нескольких компонент на противоположный, например, точка $(-k_x, k_y, k_z)$, отвечает той же стоячей волне (тому же квантовому состоянию фотона), что и точка с координатами (k_x, k_y, k_z) . Таким образом, *всем физически различным стационарным квантовым состояниям фотона в зеркальном ящике соответствуют точки, расположенные в первом октанте пространства волновых чисел* ($k_x > 0, k_y > 0, k_z > 0$). Этот результат будет использоваться в дальнейшем. Чтобы получить координаты этих точек с помощью формул (21.2)–(21.4), целочисленные параметры n, m, l должны быть положительными (ср. с текстом, который следует после формулы (9.4) данного пособия).

Рассчитаем объем, приходящийся на одно квантовое состояние фотона в пространстве волновых чисел. Соответствующие квантовым состояниям фотона точки этого пространства имеют координаты $(n\pi/A, m\pi/B, l\pi/C)$ и располагаются в вершинах прямоугольных параллелепипедов с длиной ребер $(\pi/A, \pi/B, \pi/C)$ (рис. 51). Объем K такого параллелепипеда равен:

$$K = \frac{\pi}{A} \cdot \frac{\pi}{B} \cdot \frac{\pi}{C} = \frac{\pi^3}{V}, \quad (21.6)$$

где $V = A \cdot B \cdot C$ — объем зеркального ящика (объем потенциальной ямы в обычном координатном пространстве).

Итак, на одно квантовое состояние фотона в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, объем

которой в координатном пространстве $V = A \cdot B \cdot C$, приходится объем K в пространстве волновых чисел, рассчитываемый по формуле (21.6).

Перейдем к расчету $dN(E)$ — числа квантовых состояний фотонов с энергией в интервале от E до $E + dE$. Фотону с энергией E соответствует электромагнитная волна с волновым числом k , причем имеется связь:

$$E = \hbar ck.$$

С учетом этого соотношения ясно, что каждому энергетическому интервалу $(E, E + dE)$ соответствует интервал волновых чисел $(k, k + dk)$:

$$(E, E + dE) \Leftrightarrow (k, k + dk),$$

который в пространстве волновых чисел представляется в виде объема, заключенного между двумя концентрическими сферами с центром в начале координат радиусами k и $k + dk$. Будем называть этот объем сферическим слоем радиуса k и толщиной dk . На рис. 52 показано

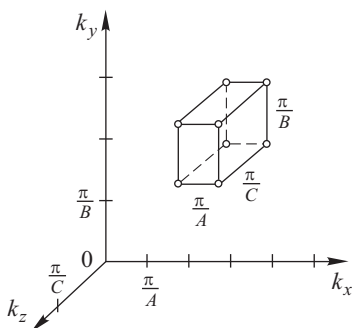


Рис. 51

сечение сферического слоя координатной плоскостью $k_x k_y$ ($k_z = 0$). Квантовым состояниям фотона в зеркальном ящике с энергией из интервала $(E, E + dE)$ соответствуют точки в пространстве волновых чисел с координатами $(n\pi/A, m\pi/B, l\pi/C)$, попадающие внутрь указанного сферического слоя (на рисунке 52 эти точки изображены в виде кружков). Причем учитывать нужно только те из них, которые расположены в первом октанте пространства волновых чисел (n, m, l — целые положительные числа).

Величину $dN(E)$ можно рассчитать, поделив объем одной восьмой части рассматриваемого сферического слоя $\frac{1}{8} \cdot 4\pi k^2 dk$ на объем K (21.6), приходящийся на одно квантовое состояние в пространстве волновых чисел:

$$dN(E) = 2 \frac{4\pi k^2 dk / 8}{\pi^3 / V}. \quad (21.7)$$

В формуле (21.7) множитель 2 перед дробью учитывает то обстоятельство, что каждому квантовому состоянию фотона, определяемому набором целочисленных параметров n, m, l , соответствуют два значения проекции спина фотона. В результате число различных квантовых состояний удваивается: каждой точке с координатами $(n\pi/A, m\pi/B, l\pi/C)$ в пространстве волновых чисел соответствует не одно, а два различных квантовых состояния фотона.

Воспользовавшись справедливым для фотонов соотношением $p = \hbar k$, перейдем в (21.7) от переменной k — волнового числа, к переменной p — импульсу фотона:

$$dN(E) = 2 \frac{4\pi k^2 dk / 8}{\pi^3 / V} = 2 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3} = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (21.8)$$

Здесь введено обозначение $d\Gamma$ для так называемого *элементарного объема в фазовом пространстве* (элементарный фазовый объем):

$$d\Gamma = 4\pi p^2 dp V. \quad (21.9)$$

Физический смысл параметра $d\Gamma$ состоит в следующем. Каждая точка элементарного объема $d\Gamma = 4\pi p^2 dp V$ соответствует фотону, модуль импульса которого принадлежит интервалу $(p, p + dp)$ (соответственно волновое число k — интервалу $(k, k + dk)$, энергия E — интервалу $(E, E + dE)$) и который помещен в объем V координатного пространства (потенциальную яму). Связь между бесконечно малыми

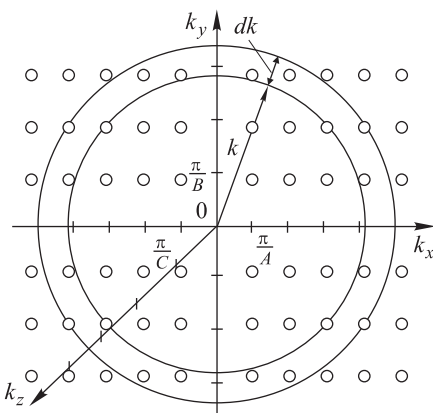


Рис. 52

интервалами импульса, энергии и волнового числа вытекает из соотношений $E = \hbar ck = pc$.

С учетом формулы (21.8) представим статистический вес $g_{\text{фот}}(E)$ фотонного газа в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками объема V в следующем виде:

$$g_{\text{фот}}(E) = \frac{dN(E)}{dE} = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{dE}. \quad (21.10)$$

Формулу (21.10) можно обобщить на находящуюся в потенциальной яме объема V систему частиц (статистический ансамбль) с произвольным спиновым квантовым числом J частицы. Для этого множитель 2 в (21.10), который учитывает два возможных значения проекции спина фотона $+1$ и -1 , следует заменить на множитель $(2J + 1)$, равный числу проекций на заданное направление спина J частицы:

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE} = (2J + 1) \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{dE}. \quad (21.11)$$

Итак, формула (21.11) позволяет рассчитать статистический вес системы частиц в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками объема V , каждая из которых характеризуется спиновым квантовым числом J .

Физический смысл величины $(2\pi\hbar)^3$ в знаменателе формул (21.8), (21.10) и (21.11) становится ясным с учетом соотношения неопределенностей для координат и импульсов частицы:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar,$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \approx 2\pi\hbar,$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \approx 2\pi\hbar.$$

Перемножив эти равенства, увидим, что *минимальный объем в фазовом пространстве, приходящийся на одно квантовое состояние частицы, равен $(2\pi\hbar)^3$* :

$$\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z \approx (2\pi\hbar)^3.$$

Примеры. 1. Рассчитаем статистический вес $g_{\text{фот}}(E)$ фотонного газа с помощью формулы (21.10), перейдя в ней от переменной p к переменной E . Связь энергии E фотона с его импульсом p : $E = pc$, где c — скорость света в вакууме. Отсюда $p = E/c$, $dp = dE/c$. Преобразовывая (21.10), получим

$$g_{\text{фот}}(E) = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3 dE} = 2 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3 dE} = \frac{E^2 V}{\pi^2 c^3 \hbar^3}. \quad (21.12)$$

2. Рассчитаем статистический вес $g(E)$ ансамбля нерелятивистских частиц со спином J с помощью формулы (21.11), перейдя в ней от переменной p к переменной E . Связь энергии E нерелятивистской

частицы с ее импульсом p : $E = p^2/(2m)$, где m — масса частицы. Отсюда $p = \sqrt{2mE}$, $dp = \sqrt{2m/E} dE$. Преобразовав (21.11), получим

$$g(E) = \frac{(2J+1)}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d\Gamma}{dE} = \frac{(2J+1)4\pi p^2 V dp}{(2\pi\hbar)^3 dE} = \frac{(2J+1)m^{3/2} V E^{1/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3}. \quad (21.13)$$

В частности, статистический вес ансамбля электронов ($J = 1/2$) в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками равен

$$g_{\text{эл}}(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} V E^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3}, \quad (21.14)$$

где m — масса электрона.

Задачи

6.1. Определить число собственных поперечных колебаний струны длины l в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$, если скорость распространения колебаний равна v . Считать, что колебания происходят в одной плоскости.

6.2. Имеется прямоугольная мембрана площадью S . Найти число собственных колебаний, перпендикулярных к ее плоскости, в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$, если скорость распространения колебаний равна v .

6.3. Показать на примере полости в виде прямоугольного параллелепипеда объема V с абсолютно отражающими стенками, что число собственных колебаний электромагнитного поля в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$ равно:

$$dZ(\omega) = \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} d\omega,$$

где c — скорость света в вакууме.

6.4. Найти с помощью соотношения неопределенностей число свободных электронов с энергиями в интервале от E до $E + dE$ в металле при температуре $T = 0$ К. Металл имеет форму прямоугольного параллелепипеда объемом V . При определении числа квантовых состояний электрона считать, что физически различны только те состояния, у которых проекции импульса различаются не меньше чем на $\Delta p_x = 2\pi\hbar/l_x$, где l_x — ребро параллелепипеда (аналогично для Δp_y , Δp_z).

6.5. При каких условиях функция распределения Ферми–Дирака приближается к классической функции распределения частиц по энергии (распределению Больцмана)?

ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

§ 22. Характеристики равновесного теплового излучения

Тепловое излучение — это испускаемое веществом электромагнитное излучение, возбуждаемое не внешними источниками энергии, а возникающее за счет внутренней энергии вещества. Излучение электромагнитных волн веществом происходит в результате переходов атомов и молекул из состояния с большей в состояние с меньшей энергией. Отличие теплового излучения от иных видов излучения электромагнитных волн веществом определяется только способом перехода атомов и молекул в возбужденное состояние: в явлениях теплового излучения такой переход осуществляется в результате теплового движения атомов и молекул.

Тепловое излучение имеет сплошной спектр, положение максимума которого зависит от температуры вещества. С повышением температуры возрастает общая энергия теплового излучения, а максимум перемещается в область малых длин волн. Тепловое излучение становится наблюдаемым в видимой области спектра при температуре излучающего тела в несколько сотен или тысяч градусов. Поверхность накалированного металла, земная атмосфера — примеры источников теплового излучения. Закономерности теплового излучения будут рассмотрены в этой главе.

Рассмотрим расположенную внутри какого-либо тела полость с непрозрачными стенками, температура которых поддерживается постоянной. Стенки полости благодаря тепловому движению атомов и молекул вещества порождают заполняющее полость излучение. Попадая на стенки полости, электромагнитные волны частично поглощаются, частично отражаются. В конце концов в полости обязательно устанавливается такое состояние, при котором за любой промежуток времени количество излучаемой веществом энергии в среднем равно количеству поглощенной энергии; при этом макроскопическое состояние излучения в полости остается неизменным во времени. Такое излучение называется *равновесным*.

Характеристики равновесного теплового излучения: объемная плотность энергии, распределение энергии по длинам волн, поляризация и др., не зависят от формы полости и материала тела, а определяются только температурой стенок. Равновесное тепловое излучение является однородным (его свойства одинаковы во всех точках полости), изотропным (все направления распространения электромагнитных волн

равновероятны) и неполяризованным (направление светового вектора \mathbf{E} в каждой точке пространства хаотически изменяется во времени). Поскольку излучение находится в тепловом равновесии со стенками, то, во-первых, можно говорить о температуре излучения как о свойстве самого излучения, а не стенок, во-вторых, температуры стенок и излучения следует считать равными друг другу (по определению понятия температуры).

В качестве физической модели для изучения свойств теплового излучения можно взять, например, полость с идеально отражающими стенками, в которой имеется поглощающее и излучающее тело A (рис. 53). Введем в полость электромагнитное излучение произвольного спектрального состава и энергии. Тело A можно взять сколь угодно малым (это может быть, например, пылинка). Тогда оно практически не будет влиять на общий тепловой баланс системы, однако благодаря наличию этого тела при любом начальном состоянии рассматриваемой системы в полости в конце концов установится состояние теплового равновесия, излучение станет равновесным. В дальнейшем будем полагать, что существование равновесного теплового излучения в полости с зеркальными стенками возможно.

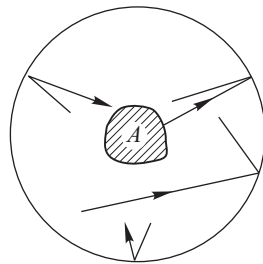


Рис. 53

Дадим определения основных физических характеристик поверхности излучающего тела, которое находится в равновесии с тепловым излучением, — энергетической светимости, спектральной испускательной способности, спектральной поглощательной способности. Затем рассмотрим характеристики собственно теплового излучения — объемную плотность и объемную спектральную плотность его энергии.

Характеристики излучающей поверхности. Энергетической светимостью или интегральной испускательной способностью M_Σ тела называется поток энергии, испускаемый участком единичной площади поверхности излучающего тела по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерадиан.

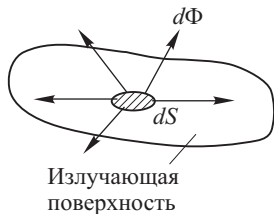


Рис. 54

Пусть $d\Phi$ — поток энергии, испускаемый по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерадиан элементарным участком площади dS поверхности излучающего тела (рис. 54). Тогда энергетическая светимость тела M_Σ равна:

$$M_\Sigma = \frac{d\Phi}{dS}. \quad (22.1)$$

Единица энергетической светимости — *ватт на метр квадратный* ($\text{Вт}/\text{м}^2$).

Энергетическая светимость зависит от температуры излучающей поверхности и является интегральной характеристикой: величина $d\Phi$ включает энергию излучения всех возможных частот ω или длин волн λ .

Спектральной испускающей способностью тела называется поток энергии, испускаемый с единицы площади поверхности излучающего тела по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерadian и отнесенный к единичному интервалу частот (длин волн) электромагнитного излучения. Обозначим через dM_ω — поток энергии, испускаемый участком единичной площади поверхности излучающего тела по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерadian и приходящийся на интервал частот $(\omega, \omega + d\omega)$ электромагнитного излучения. Спектральная испускающая способность E_ω как функция частоты ω равна

$$E_\omega = \frac{dM_\omega}{d\omega}. \quad (22.2)$$

Если поток энергии dM_ω отнесен к интервалу длин волн $(\lambda, \lambda + d\lambda)$ электромагнитного излучения, то спектральная испускающая способность E_λ как функция длины волны λ равна

$$E_\lambda = \frac{dM_\omega}{d\lambda}. \quad (22.3)$$

Единица спектральной испускающей способности E_ω — *ватт-секунда на метр квадратный* (Вт·с/м²), единица спектральной испускающей способности E_λ — *ватт на метр в кубе* (Вт/м³).

В соответствии с определением спектральная испускающая способность является функцией частоты ω (22.2) или длины волны λ (22.3) излучения. Как и энергетическая светимость M_ω , испускающая способность сильно зависит от температуры тела.

Установим связь между двумя видами E_ω и E_λ спектральной испускающей способности тела. Для этого проведем замену переменной ω на λ в формуле $dM_\omega = E_\omega d\omega$, вытекающей из (22.2):

$$dM_\omega = E_\omega d\omega = E_\omega d\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right) = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} E_\omega d\lambda = \frac{2\pi c}{\lambda^2} E_\omega |d\lambda| = E_\lambda |d\lambda|,$$

где в процессе преобразований величина $-d\lambda$ обозначена через $|d\lambda|$ с учетом того обстоятельства, что положительному приращению частоты $d\omega$ соответствует отрицательное приращение $d\lambda$ длины волны электромагнитного излучения.

Отсюда находим связь между E_ω и E_λ :

$$E_\lambda = \frac{2\pi c}{\lambda^2} E_\omega. \quad (22.4)$$

(Для того чтобы с помощью формулы (22.4) найти функцию $E_\lambda(\lambda)$, в правой части (22.4) в выражение для E_ω следует подставить $\omega = 2\pi c/\lambda$.)

На рис. 55 схематично с помощью стрелок показано электромагнитное излучение, падающее на элементарный участок площадью dS поверхности поглощающего тела.

Пусть на элементарную площадку dS поверхности тела падает поток энергии $d\Phi_{\text{пад}}$, обусловленный электромагнитными волнами с частотами в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$. Обозначим через $d\Phi_{\text{погл}}$ часть потока $d\Phi_{\text{пад}}$, которая поглощается телом. *Спектральной поглощательной способностью* или *коэффициентом поглощения* a_ω тела называется отношение потока поглощенной энергии к потоку падающей энергии:

$$a_\omega = \frac{d\Phi_{\text{погл}}}{d\Phi_{\text{пад}}}. \quad (22.5)$$

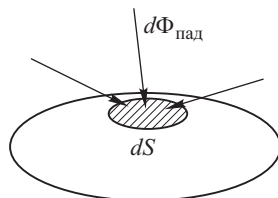


Рис. 55

Спектральная поглощательная способность a_ω — безразмерная величина; в соответствии с определением $a_\omega \leq 1$. Спектральная поглощательная способность зависит от частоты ω излучения и температуры.

Абсолютно черным телом называется тело, полностью поглощающее падающее на него электромагнитное излучение. В соответствии с определением спектральная поглощательная способность абсолютно черного тела равна единице при любой температуре для всех частот ω :

$$a_\omega \equiv 1.$$

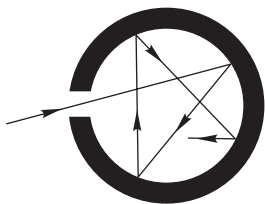


Рис. 56

Устройством, наиболее близким по своим свойствам к абсолютно черному телу, служит полость с небольшим отверстием в непрозрачном теле, стенки которого поддерживаются при постоянной одинаковой во всех точках температуре T (рис. 56). Размер отверстия должен быть мал по сравнению с диаметром полости. Попавший в полость луч испытывает многократные отражения от стенок. При каждом отражении часть энергии поглощается, в результате чего практически все излучение любой частоты, проникшее через отверстие внутрь полости, поглощается полостью. Из отверстия выходит излучение, близкое по спектральному составу к излучению абсолютно черного тела при температуре, равной температуре T стенок полости.

В ограниченном интервале частот сажа и платиновая чернь (мелкодисперсная кристаллическая платина) близки по своим свойствам к абсолютно черному телу. Однако спектральная поглощательная способность этих веществ заметно меньше единицы в далекой инфракрасной области.

Тело называется *серым*, если его спектральная поглощательная способность меньше единицы и является одинаковой для всех частот ω :

$$a_{\omega} = \text{const} < 1.$$

В 1859 году Кирхгофом (1824–1887) был установлен закон излучения, который формулируется следующим образом. *Отношение спектральной испускательной и спектральной поглощательной способностей не зависит от природы тела и является универсальной (одинаковой для всех тел) функцией частоты и температуры:*

$$\frac{E_{\omega}}{a_{\omega}} = f(\omega, T). \quad (22.6)$$

Здесь E_{ω} — спектральная испускательная, a_{ω} — спектральная поглощательная способности тела соответственно, $f(\omega, T)$ — одинаковая для всех тел функция частоты электромагнитного излучения и температуры находящегося в равновесии с тепловым излучением тела.

Согласно закону Кирхгофа тело, которое при данной температуре лучше поглощает излучение, должно интенсивнее излучать. Рассмотрим пример. Платина представляет собой серебристо-белый металл. При накаливании до высокой температуры платиновой пластинки, часть которой покрыта платиновой чернью, ее черный конец, который поглощает практически все падающее излучение, светится ярче, чем светлый, не покрытый чернью конец.

Для доказательства закона Кирхгофа рассмотрим замкнутую полость, стенки которой поддерживаются при постоянной температуре T . В полости помещены несколько тел (рис. 57). Вещества стенок полости

и тел произвольные, их поверхности не обязательно абсолютно черные. Такая система через некоторое время придет в состояние теплового равновесия — все тела примут одну и ту же температуру, равную температуре стенок, полость будет заполнена равновесным тепловым излучением. Рассмотрим два произвольным образом расположенных элементарных участка одинаковой площади $dS_1 = dS_2$ на поверхности любых двух тел (или на поверхности одного из

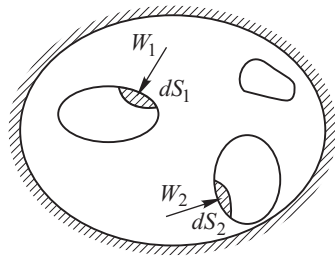


Рис. 57

тел и на стенке полости). Поскольку равновесное тепловое излучение однородно и изотропно и его характеристики одинаковы во всех точках заполненной излучением полости, можно утверждать, что на обе площадки падают одинаковые потоки энергии теплового излучения, которые мы обозначим через W_1 и W_2 , причем $W_1 = W_2$. Для двух рассматриваемых участков dS_1 и dS_2 поверхностей тел спектральные испускательные способности обозначим через $E_{\omega 1}$ и $E_{\omega 2}$, спектральные поглощательные способности — через $a_{\omega 1}$ и $a_{\omega 2}$. В условиях равновесия

поток энергии $E_{\omega_1} dS_1$, испускаемый первой площадкой, равен потоку энергии $a_{\omega_1} W_1$, поглощаемой этой же площадкой:

$$E_{\omega_1} dS_1 = a_{\omega_1} W_1. \quad (22.7)$$

Аналогичное соотношение справедливо и для потоков, испускаемого и поглощаемого второй площадкой:

$$E_{\omega_2} dS_2 = a_{\omega_2} W_2. \quad (22.8)$$

Разделив равенства (22.7) и (22.8) почленно друг на друга, учитывая, что $dS_1 = dS_2$, $W_1 = W_2$, получим

$$\frac{E_{\omega_1}}{a_{\omega_1}} = \frac{E_{\omega_2}}{a_{\omega_2}}. \quad (22.9)$$

Таким образом, отношения спектральной испускательной и спектральной поглощательной способностей двух находящихся в равновесии с тепловым излучением тел, одинаково (22.9). Поскольку тела были выбраны произвольно, соотношение (22.9) доказывает закон Кирхгофа (22.6).

Рассмотрим следствия закона Кирхгофа.

Следствие 1. Функция $f(\omega, T)$ в (22.6) представляет собой спектральную испускательную способность абсолютно черного тела, температура которого равна T .

Обозначим спектральную испускательную способность абсолютно черного тела через E_{ω}^* . Поскольку поглощательная способность a_{ω} такого тела равна единице, из (22.6) следует:

$$\frac{E_{\omega}^*}{a_{\omega}} = \frac{E_{\omega}^*}{1} = E_{\omega}^* = f(\omega, T), \quad (22.10)$$

что и требовалось доказать.

Следствие 2. Спектральная испускательная способность E_{ω} произвольного тела равна умноженной на поглощательную способность a_{ω} этого тела спектральной испускательной способности абсолютно черного тела E_{ω}^* :

$$E_{\omega} = a_{\omega} E_{\omega}^*. \quad (22.11)$$

Действительно, из (22.6) и (22.10) следует:

$$E_{\omega} = a_{\omega} f(\omega, T) = a_{\omega} E_{\omega}^*,$$

что и требовалось доказать.

Характеристики теплового излучения. Рассмотрим равновесное тепловое излучение, например, излучение в полости, стенки которой поддерживаются при постоянной температуре T . Свойства материала стенок пока не важны.

Плотность энергии теплового излучения, обозначаемая через u , — это энергия излучения всех возможных частот ω (длин волн λ), отнесенная к единице объема заполненной излучением

области пространства. Величина u одинакова во всех точках этой области. Из термодинамических соображений следует, что плотность энергии равновесного излучения зависит только от температуры и не зависит от свойств стенок полости:

$$u = u(T). \quad (22.12)$$

Единица плотности энергии — *джоуль на метр в кубе* ($\text{Дж}/\text{м}^3$).

Спектральное распределение энергии излучения можно охарактеризовать функциями $u_\omega(T)$ или $u_\lambda(T)$ спектральной плотности энергии излучения.

Спектральная плотность энергии теплового излучения u_ω равна:

$$u_\omega = \frac{du(\omega)}{d\omega}, \quad (22.13)$$

где $du(\omega)$ — часть плотности энергии излучения u , приходящаяся на интервал частот $(\omega, \omega + d\omega)$. Величина $u_\omega(T)$ — функция только частоты и температуры.

Спектральная плотность энергии теплового излучения u_λ определяется аналогично:

$$u_\lambda = \frac{du(\lambda)}{d\lambda}, \quad (22.14)$$

где $du(\lambda)$ — часть плотности энергии излучения u , приходящаяся на интервал длин волн $(\lambda, \lambda + d\lambda)$. Величина $u_\lambda(T)$ — функция только длины волны и температуры.

Единицы измерения u_ω — *джоуль-секунда на метр в кубе* ($\text{Дж} \cdot \text{с}/\text{м}^3$), u_λ — *джоуль на метр в четвертой степени* ($\text{Дж}/\text{м}^4$).

Связь между полной плотностью u и спектральными плотностями u_ω и u_λ следует из (22.13) и (22.14):

$$u = \int_0^\infty u_\omega d\omega, \quad (22.15)$$

$$u = \int_0^\infty u_\lambda d\lambda. \quad (22.16)$$

Связь между характеристиками поверхности излучающего тела и теплового излучения. Пусть теперь поверхность, которая находится в равновесии с тепловым излучением, является поверхностью абсолютно черного тела. Обозначим энергетическую светимость, спектральную испускательную способность абсолютно черного тела соответственно через M_ω^* , E_ω^* и E_λ^* .

Рассмотрим тепловое излучение в замкнутой полости с абсолютно черными стенками. Будем рассматривать это излучение как газ фотонов и распространим на него некоторые соотношения, справедливые для равновесного идеального газа молекул. Безусловно, такой прием

не является строгим, однако позволяет получить качественно верные представления о свойствах теплового излучения.

Число ударов молекул о единичную площадку стенки сосуда за единицу времени равно:

$$\nu = \frac{1}{4} n V_{\text{ср}}, \quad (22.17)$$

где n — концентрация молекул, $V_{\text{ср}}$ — их средняя тепловая скорость.

Будем считать, что с помощью аналогичной формулы можно вычислить число фотонов $\nu_{\text{фот}}$, падающих в единицу времени на единичную площадку стенки полости, в которой имеется равновесное тепловое излучение:

$$\nu_{\text{фот}} = \frac{1}{4} n c. \quad (22.18)$$

Здесь n — число фотонов в единице объема излучения, c — скорость света в вакууме (она одинакова для всех фотонов).

Все фотоны, сталкивающиеся со стенкой полости, поглощаются поверхностью абсолютно черного тела. Умножим обе части равенства (22.18) на среднюю при данной температуре энергию фотона $E_{\text{фот}}$:

$$E_{\text{фот}} \nu_{\text{фот}} = \frac{1}{4} c (E_{\text{фот}} n) = \frac{1}{4} c u. \quad (22.19)$$

Произведение $E_{\text{фот}} n = u$ представляет собой среднюю объемную плотность энергии газа фотонов или, иначе говоря, объемную плотность энергии теплового излучения u , а левая часть равенства (22.19) — это поток энергии теплового излучения, падающий на единичную площадку стенок полости. Для абсолютно черного тела поток энергии излучения, падающий на любую площадку, равен потоку энергии, испускаемому площадкой во всех направлениях в пределах телесного угла 2π , то есть энергетической светимости тела:

$$M_{\text{э}}^* = E_{\text{фот}} \nu_{\text{фот}}. \quad (22.20)$$

Из (22.19) и (22.20) получаем связь энергетической светимости абсолютно черного тела $M_{\text{э}}^*$ с плотностью энергии теплового излучения u :

$$M_{\text{э}}^* = \frac{1}{4} c u. \quad (22.21)$$

Несмотря на нестрогость вывода, полученная формула (22.21) является верной и точной.

Соотношение, аналогичное (22.21), справедливо и для спектральных характеристик поверхности абсолютно черного тела и теплового излучения — спектральной испускательной способности E_{ω}^* , E_{λ}^* и спектральной плотности энергии излучения u_{ω} , u_{λ} :

$$E_{\omega}^* = \frac{1}{4} c u_{\omega}, \quad (22.22)$$

$$E_{\lambda}^* = \frac{1}{4} c u_{\lambda}. \quad (22.23)$$

§ 23. Формула Планка. Закон смещения Вина

Распределение энергии по спектру равновесного теплового излучения описывается *формулой Планка* (1858–1947), иначе называемой *законом излучения Планка*. Эта формула — основная для равновесного теплового излучения.

Пусть равновесное тепловое излучение заполняет полость объемом V в нагретом до температуры T теле (рис. 58). Стенки полости не обязательно являются абсолютно черными.

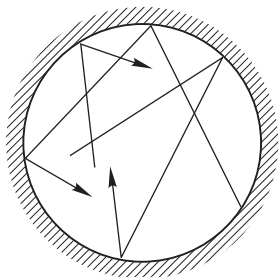


Рис. 58

Излучение можно рассматривать как фотонный газ, подобный фотонному газу в ящике с зеркальными стенками (см. § 22). Действительно, падающий на стенку фотон либо отражается, либо поглощается. Поскольку каждый поглощенный фотон замещается фотоном, испускаемым стенкой, ситуация в целом ничем не отличается от отражения всех падающих фотонов зеркальной поверхностью. Следовательно, разрешенные квантовые состояния фотонов в полости такие же, как у фотонов в зеркальном ящике.

Энергию dU излучения, занимающего частотный спектральный интервал $(\omega, \omega + d\omega)$, можно рассчитать по формуле:

$$dU = u_\omega d\omega \cdot V, \quad (23.1)$$

где u_ω — спектральная плотность энергии излучения на частоте ω ; $u_\omega d\omega$ — плотность энергии, приходящаяся на частотный интервал $d\omega$, V — объем полости, заполненной излучением.

Величина dU складывается из энергии отдельных фотонов. Рассмотрим фотоны с энергией в интервале от E до $E + dE$, которые составляют излучение с частотой в интервале от $\omega = E/\hbar$ до $\omega + d\omega = (E + dE)/\hbar$. Число таких фотонов равно $n_{\text{фот}} g(E) dE$, где $g(E)$ — статистический вес, $g(E) dE$ — число разрешенных квантовых состояний фотонов в интервале $(E, E + dE)$, $n_{\text{фот}}$ — среднее число фотонов в состоянии с энергией E . Поскольку энергия каждого фотона равна E , их суммарная энергия dU выражается формулой:

$$dU = E n_{\text{фот}} g(E) dE. \quad (23.2)$$

Подставим в (23.2) энергию фотона E :

$$E = \hbar\omega,$$

величину $n_{\text{фот}}$ из (20.2):

$$n_{\text{фот}} = \frac{1}{e^{E/(\kappa T)} - 1},$$

число состояний в интервале $(E, E + dE)$ из (21.8):

$$g(E)dE = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3},$$

где в соответствии с (21.9)

$$d\Gamma = 4\pi p^2 dp V$$

— элементарный объем в фазовом пространстве; затем выполним преобразования, подставив при этом импульс p фотона $p = E/c = \hbar\omega/c$:

$$\begin{aligned} dU &= \hbar\omega \frac{1}{e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1} \cdot 2 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3} = \hbar\omega \frac{1}{e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1} \cdot 2 \frac{4\pi (\hbar\omega/c)^2 d(\hbar\omega/c) V}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= \frac{\hbar\omega^3 V}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1)} d\omega. \end{aligned} \quad (23.3)$$

Приравнявая правые части (23.1) и (23.3), получим *формулу Планка*:

$$u_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1)}. \quad (23.4)$$

Формула (23.4) выражает зависимость спектральной плотности энергии излучения u_ω от частоты и температуры.

Зависимость $u_\lambda(T)$ найдем, выполнив замену переменной ω на λ в произведении $u_\omega d\omega$:

$$\begin{aligned} u_\omega d\omega &= \frac{\hbar(2\pi c/\lambda)^3}{\pi^2 c^3 (e^{2\pi c\hbar/(\lambda\kappa T)} - 1)} d\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right) = \\ &= -\frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5 (e^{2\pi c\hbar/(\lambda\kappa T)} - 1)} d\lambda = \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5 (e^{2\pi c\hbar/(\lambda\kappa T)} - 1)} |d\lambda| = u_\lambda |d\lambda|. \end{aligned}$$

Сократив на $|d\lambda|$ обе части последнего равенства, найдем

$$u_\lambda = \frac{16\pi^2 \hbar c}{\lambda^5 (e^{2\pi c\hbar/\lambda\kappa T} - 1)}. \quad (23.5)$$

Формула (23.5) выражает зависимость спектральной плотности энергии излучения u_λ от длины волны и температуры и представляет собой другую форму записи закона излучения Планка.

Вид графиков функций (23.4) и (23.5) показан на рисунках 59 и 60. Это кривые с максимумами. Спад кривых в сторону малых частот (больших длин) волн объясняется уменьшением статистического веса $g(E)$, а спад в сторону больших частот (малых длин волн) — уменьшением числа заполнения уровней $n_{\text{фот}}(E)$ при увеличении энергии уровня. На рис. 60 зависимость от длины волны величины u_λ представлена для нескольких значений температуры. При повышении температуры спектральная плотность излучения возрастает на всех длинах волн, а максимум функции u_λ смещается в сторону коротких волн.

Закон излучения Планка, выражаемый формулами (23.4) и (23.5), теоретически был получен А. Эйнштейном (1879–1955) в 1916 году.

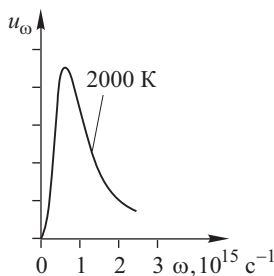


Рис. 59

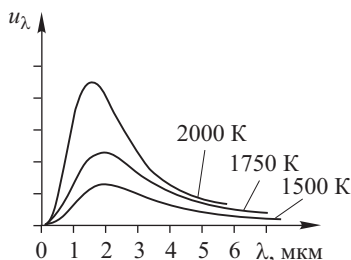


Рис. 60

Закон смещения Вина. Спектральная испускающая способность абсолютно черного тела E_λ^* и спектральная плотность энергии излучения u_λ связаны прямой пропорциональной зависимостью (22.23): $E_\lambda^* = cu_\lambda/4$. Чтобы найти длину волны, соответствующую максимуму функций u_λ и E_λ^* , нужно приравнять к нулю производную по переменной λ функции u_λ (23.5) и решить полученное уравнение относительно λ :

$$\frac{du_\lambda}{d\lambda} = 0. \quad (23.6)$$

Уравнение (23.6) является трансцендентным, его приближенное решение имеет вид

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}, \quad (23.7)$$

где λ_{\max} — длина волны, при которой достигают максимума спектральная плотность излучения u_λ и спектральная испускающая способность E_λ^* , T — абсолютная температура, b — некоторая постоянная, которая не может быть выражена с помощью аналитических функций. Экспериментальное значение этой постоянной равно

$$b = 0,0029 \text{ м} \cdot \text{К}.$$

Формула (23.7) выражает *закон смещения Вина* (1864–1928), согласно которому при повышении температуры T абсолютно черного тела соответствующая максимуму его спектральной испускающей способности длина волны смещается в сторону коротких волн; при этом λ_{\max} обратно пропорциональна абсолютной температуре T тела.

Аналогичным образом, дифференцируя (23.4) по ω и приравнявая к нулю полученную производную, можно найти частоту ω_{\max} , при которой достигает максимума спектральная плотность энергии излучения u_ω и спектральная испускающая способность E_ω^* абсолютно

черного тела, связанные между собой зависимостью (22.22): $E_{\omega}^* = c u_{\omega}/4$. Вычисление дает

$$\omega_{\max} = 2,8 \frac{\varkappa T}{\hbar}, \quad (23.8)$$

где \varkappa — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, \hbar — постоянная Планка. В соответствии с (23.8) при повышении температуры максимум функций смещается в сторону больших частот.

При фиксированной температуре T абсолютного черного тела и равновесного теплового излучения максимумы функций u_{ω} (E_{ω}^*) и u_{λ} (E_{λ}^*) располагаются в разных областях спектра (это значит, что определяемые формулами (23.7) и (23.8) λ_{\max} и ω_{\max} не связаны соотношением $\lambda = 2\pi c/\omega$). Так, при $T=6000$ К, что соответствует температуре фотосферы Солнца, максимум функции u_{λ} приходится на длину волны $\lambda_{\max}=483$ нм, а максимум функции u_{ω} — на частоту $\omega_{\max}=2,2 \cdot 10^{15}$ с⁻¹, что соответствует длине волны $\lambda = 2\pi c/\omega_{\max} = 856$ нм.

Формулы (23.7) и (23.8) используются для определения температуры тел по их цвету. Если тело можно считать абсолютно черным, а испускаемое им излучение — равновесным, то путем спектрального исследования излучения можно найти λ_{\max} и по формуле (23.7) вычислить так называемую «цветовую» температуру тела.

§ 24. Закон Стефана–Больцмана

С помощью формулы Планка (23.4) вычислим интегральную характеристику равновесного теплового излучения — плотность энергии u . Для этого проинтегрируем u_{ω} по частоте ω в пределах от нуля до бесконечности:

$$\begin{aligned} u(T) &= \int_0^{\infty} u_{\omega} d\omega = \int_0^{\infty} \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/(\varkappa T)} - 1)} = \frac{\varkappa^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{(\hbar\omega/(\varkappa T))^3 d(\hbar\omega/(\varkappa T))}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/(\varkappa T)} - 1)} = \\ &= \frac{\varkappa^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\varkappa^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15} = \frac{\pi^2 \varkappa^4 T^4}{15 c^3 \hbar^3}. \end{aligned}$$

В процессе преобразований была проведена замена переменной интегрирования ω на $x = \hbar\omega/(\varkappa T)$.

Окончательно, выражение для полной плотности энергии теплового излучения как функции температуры T имеет вид

$$u(T) = \sigma' T^4, \quad (24.1)$$

где коэффициент пропорциональности равен

$$\sigma' = \frac{\pi^2 \varkappa^4}{15 c^3 \hbar^3}. \quad (24.2)$$

Формула (24.1) выражает закон *Стефана–Больцмана*, согласно которому плотность энергии теплового излучения u пропорциональна четвертой степени его температуры T .

Используя формулы (24.1), (24.2) и (22.21), найдем энергетическую светимость M_γ^* абсолютно черного тела:

$$M_\gamma^* = \frac{1}{4}cu = \frac{1}{4}c\sigma'T^4 = \frac{\pi^2\kappa^4}{60c^2\hbar^3}T^4 = \sigma T^4.$$

Окончательно имеем

$$M_\gamma^* = \sigma T^4, \quad (24.3)$$

где коэффициент пропорциональности σ равен

$$\sigma = \frac{\pi^2\kappa^4}{60c^2\hbar^3}. \quad (24.4)$$

Формула (24.3) выражает закон *Стефана–Больцмана*, согласно которому энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени его температуры. Константа σ (24.4) называется постоянной Стефана–Больцмана. Величина M_γ^* определяет полную мощность излучения, испускаемого с единицы площади поверхности абсолютно черного тела.

Закон Стефана–Больцмана впервые был сформулирован на основе экспериментальных данных в 1879 году австрийским физиком Й. Стефаном (1835–1898), а теоретически доказан термодинамическими методами в 1884 году австрийским физиком Л. Больцманом (1844–1906). Формула Планка (23.4), полученная гораздо позднее закона Стефана–Больцмана, позволяет, однако, вычислить постоянные σ' или σ (см. (24.2), (24.4)), которые до этого брались из опыта. Постоянная Стефана–Больцмана σ является фундаментальной физической константой, равной: $\sigma \approx 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4)$.

Формула Рэлея–Джинса. Формула Рэлея–Джинса выражает зависимость спектральной плотности энергии теплового излучения u_ω от частоты ω в области низких частот, а именно, при выполнении условия:

$$\hbar\omega \ll \kappa T. \quad (24.5)$$

Эту формулу можно получить из формулы Планка (23.4), если учесть, что при выполнении условия (24.5) показатель экспоненты является малым параметром: $\hbar\omega/(\kappa T) \ll 1$ и воспользоваться приближенным соотношением $e^x \approx 1 + x$ при $x \ll 1$. Итак:

$$u_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1)} \approx \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 \hbar\omega/(\kappa T)} = \frac{\kappa T}{\pi^2 c^3} \omega^2. \quad (24.6)$$

Формулы Рэлея–Джинса (24.6) иногда представляют в следующем виде:

$$u_\omega d\omega = \frac{\kappa T}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega, \quad (24.7)$$

подчеркивая тем самым, что энергия излучения, приходящаяся на интервал частот от ω до $\omega + d\omega$, пропорциональна квадрату частоты.

Закон Рэлея–Джинса (24.7) был получен в начале двадцатого века на основе классических представлений о равномерном распределении энергии по степеням свободы молекул английскими учеными Дж. У. Рэлеем (1842–1919) и Дж. Джинсом (1877–1946). Они распространили эти представления на тепловое излучение. В этом случае равновесное излучение в замкнутой полости представляется как статистический ансамбль гармонических осцилляторов (стоячих волн), на каждую степень свободы осциллятора приходится в среднем энергия, равная κT . Число разрешенных квантовых состояний фотонов (в энергетическом интервале от E до $E + dE$ оно равно $g(E)dE$) соответствует в классической физике числу степеней свободы ансамбля осцилляторов. Энергия теплового излучения в полости объемом V , приходящаяся на интервал $(E, E + dE)$ или соответствующий интервал частот $(\omega, \omega + d\omega)$, складывается из энергии всех осцилляторов и равна

$$\begin{aligned} dU &= \kappa T g(E) dE = \kappa T \cdot 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = \kappa T \cdot 2 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= \kappa T \cdot 2 \frac{4\pi (\hbar\omega/c)^2 d(\hbar\omega/c)}{(2\pi\hbar)^3} V = \frac{\kappa T \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} V, \end{aligned}$$

что совпадает с (24.7) (чтобы получить из величины dU плотность энергии, нужно последнее равенство разделить на объем V).

Зависимость (24.6) хорошо согласуется с экспериментом только для малых частот (в длинноволновой области видимого спектра) при выполнении условия (24.5). Если бы формула (24.6) была применима не только к малым, но и ко всем частотам, то полная энергия теплового излучения оказалась бы бесконечно большой, так как при интегрировании по частоте в пределах от нуля до бесконечности интеграл расходится:

$$U = \int_0^{\infty} \frac{\kappa T \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} V = \infty.$$

Отсюда следует, что по теории Рэлея–Джинса тепловое равновесие между веществом и излучением невозможно, что противоречит опыту. Это противоречие получило название «ультрафиолетовой катастрофы». Причина его в том, что в теории Рэлея–Джинса излучение в полости имеет бесконечное, а вещество стенок — конечное число степеней свободы. Если бы было справедливо равномерное распределение энергии по степеням свободы, то при тепловом равновесии вся энергия должна была бы сосредоточиться в излучении. В квантовой физике никакого противоречия не возникает. Формула (24.6) получается из закона излучения Планка только при малых частотах (когда $\hbar\omega \ll \kappa T$); при больших частотах эта формула не верна, также как и закон о равномерном распределении энергии.

Задачи

7.1. Имеются два абсолютно черных источника теплового излучения. Температура одного из них $T = 2500$ К. Найти температуру другого источника, если длина волны, отвечающая максимуму его испускательной способности, на $\Delta\lambda = 0,50$ мкм больше длины волны, соответствующей максимуму испускательной способности первого источника.

7.2. Энергетическая светимость абсолютно черного тела $M_\varepsilon = 3,0$ Вт/см². Определить длину волны, отвечающую максимуму испускательной способности этого тела.

7.3. Имеются две полости (см. рис. 5.39) с малыми отверстиями одинаковых диаметров $d = 1,0$ см и абсолютно отражающими наружными поверхностями. Расстояние между отверстиями $l = 10$ см. В полости 1 поддерживается постоянная температура $T_1 = 1700$ К. Вычислить установившуюся температуру в полости 2. Плоскости отверстий параллельны друг другу и перпендикулярны проходящий через их центры прямой.

Указание. Иметь в виду, что абсолютно черное тело является косинусным излучателем.

7.4. Полость объемом $V = 1,0$ л заполнена тепловым излучением при температуре $T_1 = 1000$ К. Найти: а) теплоемкость C_V ; б) энтропию S этого излучения.

7.5. Найти уравнение адиабатического процесса (в переменных V, T), проводимого с тепловым излучением, имея в виду, что между давлением и плотностью энергии теплового излучения существует связь $p = u/3$.

ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

Внутреннее движение частиц, из которых состоит тело, в частности, тепловое движение, может быть описано двумя способами: 1) как совокупность движений каждой индивидуальной частицы; 2) как результат наложения коллективных движений (волн), в каждом из которых участвуют все частицы. Второй способ обладает преимуществом, когда частицы тела взаимодействуют друг с другом, как это имеет место в твердом кристаллическом теле. Разложение движения всех частиц тела на составляющие коллективные движения можно произвести так, чтобы каждое движение могло возбуждаться и существовать в отдельности в отсутствие остальных.

На математическом языке такой переход является переходом от координат индивидуальных частиц к нормальным обобщенным координатам системы в целом, при этом коллективные движения представляют собой так называемые *нормальные колебания* системы осцилляторов. Колебание каждого осциллятора — это одновременное согласованное (коллективное) движение всех частиц тела.

Если внутреннее движение частиц тела не очень интенсивное, оно может быть разложено на плоские монохроматические волны различных частот, распространяющиеся в теле в различных направлениях практически независимо друг от друга. Плоская волна — это тоже пример коллективного движения. Попытка математически описать движение каждой частицы тела всегда приводит к появлению системы из огромного числа уравнений. Переход от рассмотрения колебаний отдельных частиц к совокупности плоских монохроматических волн позволяет значительно упростить задачу.

Прежде чем приступить к изучению тепловых свойств кристаллических решеток — теплоемкости и теплопроводности, рассмотрим особенности распространения упругих волн в кристаллах сравнительно с волнами в сплошной упругой среде. В настоящей главе упругие волны любой частоты, от самых низких до самых высоких, не воспринимаемых человеческим ухом ($\sim 10^{11}$ – 10^{13} Гц), будем называть звуковыми волнами.

§ 25. Звуковые волны в кристаллах

Упругие волны в сплошной среде. В разделе курса «Колебания и волны» (см. кн. 4 «Колебания и волны. Оптика», § 10) рассматривалось

распространение волн в сплошной среде, обладающей сопротивлением растяжению и сдвигу (сплошной упругой среде). Модель сплошной или непрерывной среды предполагает, что в любом бесконечно малом ее объеме содержится огромное число частиц, способных совершать колебания около своих положений равновесия.

Если $\xi(x, t)$ — это смещение из положения равновесия частицы среды, то уравнение распространяющейся вдоль оси x плоской монохроматической волны в комплексной форме имеет вид

$$\xi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)}, \quad (25.1)$$

где A — амплитуда, ω — циклическая частота, k — волновое число.

Частота ω , волновое число k и скорость V волны (фазовая скорость) связаны между собой соотношением:

$$k = \frac{\omega}{V}. \quad (25.2)$$

Фазовая скорость V — постоянная величина, зависящая от свойств среды. Так, в упругой среде с плотностью ρ и модулем Юнга E скорость продольной звуковой волны равна:

$$V = \sqrt{\frac{E}{\rho}}.$$

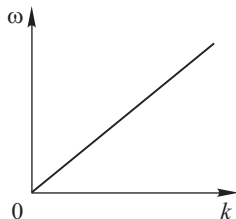


Рис. 61

График зависимости ω от k упругой волны в сплошной среде представлен на рис. 61. Поскольку скорость волны V — постоянная величина, частота ω прямо пропорциональна волновому числу k .

Скорость поперечных волн в среде, обладающей сопротивлением сдвигу, определяется величиной модуля сдвига и отличается от скорости продольных волн.

Типы химической связи в кристаллах. В отличие от сплошной среды, модель которой использовалась при выводе уравнения упругой волны, кристалл обладает дискретной структурой. Частицы вещества (атомы, ионы) располагаются в узлах кристаллической решетки, обладающей пространственной периодичностью. Кристаллическая решетка образована из тождественных элементарных ячеек. В общем случае каждая такая ячейка представляет собой косоугольный параллелепипед с длинами ребер a , b , c . Направления ребер можно принять за направления координатных осей. Длины ребер являются *периодами кристаллической решетки* (периодами идентичности) в направлениях соответствующих осей.

Различают *ионные, ковалентные, молекулярные* кристаллы и *металлы*.

Кристаллическая решетка ионных кристаллов состоит из положительных и отрицательных ионов, притягивающихся друг к другу. Ионы образуются в результате перехода электронов от одного атома к дру-

гому. Типичным представителем ионных кристаллов служит кристалл поваренной соли NaCl. Элементарной ячейкой так называемой *гранецентрированной кубической* решетки служит куб, в вершинах и центрах граней которого расположены ионы натрия и хлора (см. рис. 62).

Ионные кристаллы характеризуются большой *энергией связи* (энергией связи — это работа, которую нужно совершить, чтобы разложить систему на составные части, в частности, на ионы натрия и хлора в случае кристалла поваренной соли). Энергия связи решетки NaCl составляет 764 кДж/моль.

В *ковалентных кристаллах*, примерами которых служат алмаз, кремний, германий, связь между атомами ковалентная (такая же как в молекуле водорода). Строение ковалентной решетки таково, что число ближайших атомов, окружающих рассматриваемый атом, равно валентности элемента. Энергия связи у ковалентных кристаллов примерно 700–1200 Дж/моль.

Молекулярные кристаллы представляют собой системы слабо связанных друг с другом молекул. Связь обусловлена силами Ван-дер-Ваальса. Молекулярными кристаллами являются: кристаллы органических соединений, например, метана CH_4 ; кристаллы, образованные из атомов инертных газов, например, аргона Ag. Энергия связи у таких веществ примерно 8 кДж/моль.

Связь атомов в *металлах* осуществляется посредством электронов, находящихся между ионами кристаллической решетки. К металлам относятся химические элементы, атомы которых содержат внешние недостроенные оболочки. Электроны таких оболочек слабо связаны с атомными ядрами, они могут переходить и переходят от одного атома к другому. В результате ядра металла лишаются своих внешних электронных оболочек. Их электроны не привязаны к индивидуальным атомам, а обобществлены, то есть принадлежат всему кристаллу. Такие почти свободные электроны ведут себя подобно электронному газу. Каждый ион кристаллической решетки металла заряжен положительно. Поэтому между ионами действуют электрические силы отталкивания. Свободные электроны уравнивают эти силы и удерживают ионы в положениях равновесия. Если ион выходит из положения равновесия, свободные электроны перераспределяются в пространстве так, что возникают силы, возвращающие ион в положение равновесия.

Узлы кристаллической решетки представляют собой положения равновесия частиц вещества — атомов, ионов, атомных ядер. Колебания расположенных в узлах частиц вещества, которые для краткости будем называть просто атомами, могут происходить по двум причинам: 1) вследствие хаотического теплового движения; 2) под действием

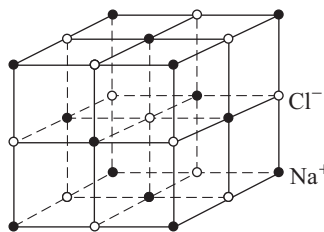


Рис. 62

распространяющихся в кристалле звуковых волн. Тепловые колебания атомов путем разложения их в интеграл или ряд Фурье могут быть сведены к системе плоских монохроматических волн, то есть к суперпозиции звуковых волн. Рассмотрим закономерности внутренних движений атомов кристалла на одномерной модели — линейной цепочке, состоящей из одинаковых атомов.

Уравнение колебаний атомов кристаллической решетки и его решения. Простейшей моделью кристалла является безграничная линейная цепочка одинаковых атомов массой m , связанных между собой одинаковыми «пружинками» с коэффициентом жесткости γ (рис. 63).

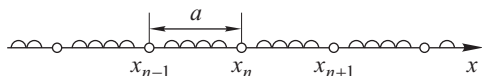


Рис. 63

Пусть координатная ось x совпадает с прямой, вдоль которой расположены атомы. В положении равновесия, когда пружинки не деформированы, расстояние между любыми двумя соседними атомами равно a (период решетки). Каждый атом может двигаться, совершая колебания, только в одном направлении — вдоль оси x . Рассматриваемая система атомов представляет собой одномерную модель кристалла.

Число атомов в цепочке бесконечно велико. Введем следующие обозначения:

n — порядковый номер атома, $n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2 \dots$;

x_n — координата положения равновесия n -го атома;

$\xi(n, t)$ — величина смещения из положения равновесия в момент времени t атома с порядковым номером n ($\xi(n, t) = 0$, если атом находится в положении равновесия, $\xi(n, t) > 0$ при смещении в положительном, $\xi(n, t) < 0$ при смещении в отрицательном направлении оси x).

Пусть атомы кристалла, участвуя в каком-либо внутреннем движении, например, совершая тепловые колебания, выведены из своих положений равновесия, пружинки деформированы (рис. 64). Силы упругости F_1 и F_2 , действующие на n -й атом со стороны связанных с ним пружинок, равны:

$$F_1 = \gamma(\xi(n+1, t) - \xi(n, t)), \quad (25.3)$$

$$F_2 = \gamma(\xi(n, t) - \xi(n-1, t)), \quad (25.4)$$

где $\xi(n+1, t)$, $\xi(n, t)$, $\xi(n-1, t)$ — смещения атомов с порядковыми номерами $n+1$, n и $n-1$. В зависимости от соотношения между перечисленными смещениями соседних атомов величины F_1 и F_2 могут быть положительными или отрицательными, а направление действующей на n -й атом результирующей силы будет меняться. На рис. 64 показан один из частных случаев направления действия сил.

Уравнение движения n -го атома под действием сил F_1 и F_2 (второй закон Ньютона) имеет вид

$$m\ddot{\xi}(n, t) = F_1 - F_2, \quad (25.5)$$

где $\ddot{\xi}(n, t)$ — вторая производная по времени смещения атома (его ускорение). Подставив в (25.5) F_1 и F_2 из (25.3) и (25.4), получим

$$m\ddot{\xi}(n, t) = \gamma(\xi(n+1, t) - 2\xi(n, t) + \xi(n-1, t)). \quad (25.6)$$

Уравнения типа (25.6) должны быть записаны для всех атомов цепочки, они представляют собой систему из бесконечно большого

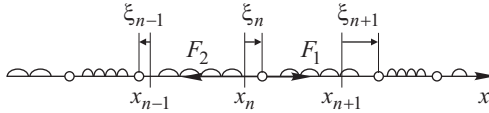


Рис. 64

числа уравнений, решить которую прямыми методами невозможно. Будем искать решение системы в виде уравнения волны, бегущей вдоль оси x :

$$\xi_k(x, t) = A_k e^{-i(\omega t - kx)}, \quad (25.7)$$

где ω — циклическая частота, k — волновое число, A_k — некоторая константа (амплитуда волны). Поскольку волна (25.7) описывает смещения из положений равновесия атомов, расположенных в узлах решетки, особенность волны состоит в том, что ее аргумент x может принимать только дискретные значения

$$x = an,$$

где n — любое целое число, a — период решетки. Поэтому уравнение бегущей волны следует записывать в виде

$$\xi_k(n, t) = A_k e^{-i(\omega t - kan)}. \quad (25.8)$$

Подставляя (25.8) в (25.6) и выполняя простые преобразования, приходим к соотношению:

$$\begin{aligned} -\omega^2 A_k e^{-i(\omega t - kan)} &= \gamma A_k e^{-i\omega t} (e^{ika(n+1)} - 2e^{ikan} + e^{ika(n-1)}), \\ -m\omega^2 &= \gamma(e^{ika} - 2 + e^{-ika}), \\ -m\omega^2 &= \gamma(2\cos ka - 2), \\ m\omega^2 &= 4\gamma \sin^2 \frac{ka}{2}, \\ \omega &= 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|. \end{aligned} \quad (25.9)$$

Функция $\omega(k)$ (25.9) является периодической с периодом $2\pi/a$. Ее график показан на рис. 65.

Полученный результат подразумевает следующее. Для того чтобы уравнение бегущей волны (25.8) являлось решением системы записанных для всех атомов кристалла уравнений типа (25.6), частота волны ω и ее волновое число k должны быть связаны соотношением (25.9). При этом волновое число k и амплитуда волны A_k могут принимать любые значения.

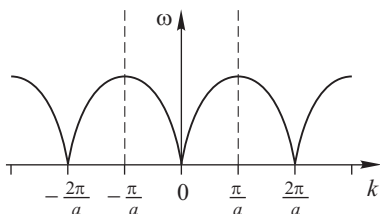


Рис. 65

Таким образом, уравнение (25.8) является частным решением рассматриваемой системы. Общее решение представляется в виде интеграла (суперпозиции) решений (25.8):

$$\xi(n, t) = \int_0^{\infty} A_k e^{-i(\omega t - kan)} dk. \quad (25.10)$$

Выражение (25.10) по существу представляет собой интеграл Фурье, с помощью которого может быть описано любое не слишком интенсивное движение атомов кристалла.

Полученный результат подтверждает положение, сформулированное в начале этой главы: любое внутреннее движение атомов кристалла, в том числе тепловое, может быть представлено в виде системы бегущих волн, частота которых определенным образом связана с волновым числом (см. (25.9)), то есть любое внутреннее движение является наложением коллективных движений (волн). В случае трехмерного кристалла нужно рассматривать суперпозицию плоских монохроматических волн, распространяющихся в различных направлениях.

Систематизируем свойства звуковых волн в кристалле.

Свойства звуковых волн в кристалле. 1. Уравнение плоской монохроматической волны, бегущей в положительном направлении оси x в одномерном кристалле с периодом решетки a , имеет вид (25.8):

$$\xi_k(n, t) = A_k e^{-i(\omega t - kan)}. \quad (25.11)$$

где $\xi_k(n, t)$ — смещение из положения равновесия атома с порядковым номером n ; k — волновое число, которое может принимать, вообще говоря, любое значение; A_k — амплитуда волны, не связанная какой-либо зависимостью с волновым числом k , может быть любой.

Хаотическое тепловое движение n -го атома кристалла, при котором величина $\xi_k(n, t)$ является ограниченной функцией времени, может быть представлено в виде интеграла гармонических функций (25.11) с различными значениями волнового числа k и соответствующими амплитудами A_k (интеграл Фурье):

$$\xi(n, t) = \int_0^{\infty} A_k e^{-i(\omega t - kan)} dk. \quad (25.12)$$

2. Циклическая частота ω и волновое число k бегущей волны в кристалле связаны между собой соотношением (25.9):

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad (25.13)$$

где m — масса атома, γ — коэффициент жесткости пружинки (параметр, зависящий от свойств кристалла).

Зависимость частоты ω от волнового числа k называется *законом дисперсии*. Соотношение (25.13) и соответствующий график, показанный на рис. 65, называются *акустической ветвью* закона дисперсии (существуют и иные дисперсионные соотношения между ω и k , называемые *оптическими ветвями*, см. ниже).

Зависимости $\omega(k)$ для звуковых волн в кристалле (25.13) и в сплошной упругой среде (25.2) существенно отличаются друг от друга (ср. графики на рисунках 57 и 61). В частности, частота ω распространяющейся в сплошной среде волны может быть сколь угодно большой, однако у волны в кристалле она ограничена:

$$\omega \leq \omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}}. \quad (25.14)$$

Поскольку функция $\omega(k)$ (25.13) является периодической с периодом $2\pi/a$, то при замене k на $k + 2\pi/a$ частота ω возвращается к прежнему значению. Две звуковые волны вида (25.11), которые характеризуются волновыми числами k и $k + 2\pi/a$, являются тождественными. Действительно, обе эти волны вызывают одинаковые смещения атома, расположенного в произвольном n -м узле решетки:

$$\begin{aligned} \xi_{k+2\pi/a}(n, t) &= Ae^{-i(\omega t - (k+2\pi/a)an)} = \\ &= Ae^{-i(\omega t - kan)} e^{2\pi ni} = Ae^{-i(\omega t - kan)} = \xi_k(n, t). \end{aligned}$$

Таким образом, если волновое число k заменить на $k + (2\pi/a)m$, где m — любое целое число, то колебания всех атомов цепочки не изменятся. Поэтому не нарушая общности можно ограничить изменения k одним интервалом длины $2\pi/a$, называемым *зоной Бриллюэна* (1889–1969). Все остальные значения k могут быть приведены к значениям, лежащим в указанном интервале.

Зоной Бриллюэна называется интервал значений волнового числа k , которым соответствуют физически различные звуковые волны. *Первой зоной Бриллюэна* называется выбранный таким образом интервал, что точка $k = 0$ лежит в его центре:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (25.15)$$

Все значения k звуковых волн могут быть приведены к значениям, лежащим в первой зоне Бриллюэна, путем прибавления величины $2\pi m/a$, где m — соответствующее целое число, положительное, отрицательное или нуль.

Вторая зона Бриллюэна представляет собой два интервала значений k , расположенных отдельно друг от друга симметрично относительно точки $k = 0$:

$$-\frac{2\pi}{a} \leq k \leq -\frac{\pi}{a}, \quad \frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{2\pi}{a}.$$

Третья зона Бриллюэна:

$$-\frac{3\pi}{a} \leq k \leq -\frac{2\pi}{a}, \quad \frac{2\pi}{a} \leq k \leq \frac{3\pi}{a},$$

и т. д.

Напомним, что a в (25.15) — это период кристаллической решетки, величина $2\pi/a$ называется *периодом обратной решетки* (в случае одномерного кристалла).

При положительных k волна бежит в положительном направлении оси x , при отрицательных k — в обратном направлении. В пределах первой зоны Бриллюэна длина волны λ (величина существенно положительная) изменяется в пределах:

$$2a \leq \lambda \leq \infty. \quad (25.16)$$

Из-за дискретности структуры кристалла на имеет смысла говорить о распространении в нем волн, длины которых меньше $2a$. Если $\lambda < 2a$, закон движения атомов кристалла такой же, как для некоторой волны интервала (25.16).

3. Фазовая скорость гармонической волны вычисляется по формуле:

$$V_{\Phi} = \frac{\omega}{k},$$

где ω — циклическая частота, k — волновое число. Найдем ее для звуковой волны в кристалле, используя соотношение (25.13):

$$V_{\Phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{k} \cdot 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \sin \frac{ka}{2} = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \frac{\sin(ka/2)}{ka/2}. \quad (25.17)$$

(Учитывая, что при положительных значениях k в пределах первой зоны Бриллюэна $\sin(ka/2)$ — величина неотрицательная, при вычислении V_{Φ} имеющийся в формуле (25.13) знак модуля опущен. В (25.17) выделен множитель вида $(\sin x)/x$, поскольку свойства этой функции хорошо известны.)

График функции (25.17) показан на рис. 66. Видно, что фазовая скорость V_{Φ} звуковой волны в кристалле не является постоянной величиной, в отличие от фазовой скорости упругих волн в сплошной среде (см. формулу (25.2) и следующий за ней текст). Зависимость фазовой скорости V_{Φ} от волнового числа k или

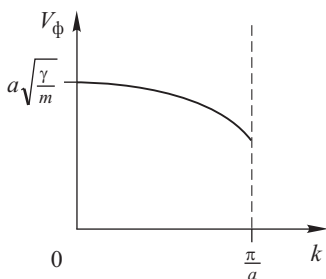


Рис. 66

от длины волны λ означает, что имеет место дисперсия звуковых волн в кристалле (см. кн. 4 «Колебания и волны. Оптика», гл. VIII).

При малых значениях k ($k \rightarrow 0$) и больших λ ($\lambda = 2\pi/k \rightarrow \infty$) из (25.17) следует:

$$V_{\phi} = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \frac{\sin(ka/2)}{ka/2} \approx a\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \frac{ka/2}{ka/2} = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}} = V_{\phi \max}. \quad (25.18)$$

В этих условиях фазовая скорость достигает наибольшего возможного значения и является практически постоянной, не зависящей от k или λ величиной. Этот результат является ожидаемым для длинных волн: если длина волны велика по сравнению с постоянной решетки ($\lambda \gg a$), для такой волны кристалл по существу не отличается от сплошной среды, в которой дисперсия звуковых волн не имеет места.

При увеличении волнового числа k , согласно (25.17), фазовая скорость уменьшается, достигая на границе зоны Бриллюэна при $k = \pi/a$ минимального значения:

$$V_{\phi \min} = \frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{\gamma}{m}}, \quad (25.19)$$

Величина $V_{\phi \min}$ в $\pi/2$ раз или приблизительно на 30 % меньше своего максимального значения (25.18):

$$V_{\phi \min} \approx 0,7V_{\phi \max}. \quad (25.20)$$

4. Групповая скорость рассчитывается по обычной формуле:

$$V_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk},$$

которая для звуковой волны в кристалле с учетом (25.13) дает:

$$V_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \cos \frac{ka}{2}. \quad (25.21)$$

График зависимости $V_{\text{гр}}$ от волнового числа k представлен на рис. 67. Как следует из (25.21), у границы зоны Бриллюэна групповая скорость обращается в нуль:

$$V_{\text{гр}} = 0 \quad \text{при} \quad k = \pi/a.$$

Этот результат означает, что звуковые волны с волновым числом k , принадлежащим границе первой зоны Бриллюэна, в кристалле не распространяются.

Из (25.20) следует, что при $k \rightarrow 0$ групповая скорость становится равна фазовой:

$$V_{\text{гр}} = a\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \cos \frac{ka}{2} \approx a\sqrt{\frac{\gamma}{m}} = V_{\phi} = s. \quad (25.22)$$

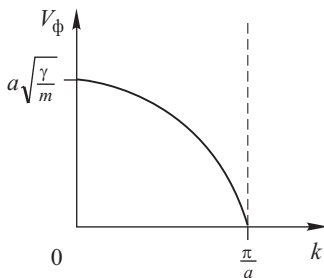


Рис. 67

Эта общая скорость называется скоростью звука в кристалле и обозначается буквой s .

5. Рассмотренная одномерная модель кристалла в виде линейной цепочки одинаковых атомов является упрощенной. Пространственные звуковые волны в реальных трехмерных кристаллах периодичны по волновому вектору \mathbf{k} . Их всегда можно привести в первую зону Бриллюэна, которая является трехмерной.

В твердых телах могут распространяться звуковые волны двух типов — продольные (колебания атомов происходят вдоль направления распространения волны) и поперечные (атомы колеблются в направлении, перпендикулярном к направлению распространения волны). Скорость звука для продольных волн s_{\parallel} больше, чем для поперечных s_{\perp} . Так, в алюминии, $s_{\parallel} = 6400$ м/с, $s_{\perp} = 3130$ м/с.

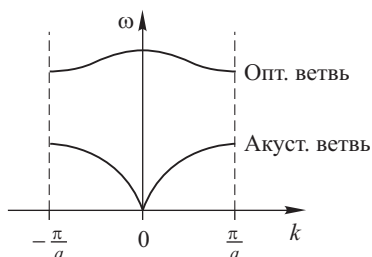


Рис. 68

6. Если в элементарной ячейке кристаллической решетки имеются атомы различных видов, в частности, отличающиеся по массе, то помимо уже рассмотренных колебаний, для которых зависимость $\omega(k)$ описывается формулой, подобной (25.13), возникают новые типы колебаний, для которых зависимость $\omega(k)$ иная, в частности, при $k \rightarrow 0$ частота ω не стремится к нулю. На рис. 68 при-

ведены графики двух различных законов дисперсии, характерных для кристалла с двумя разными атомами в элементарной ячейке. Эти графики представляют собой две ветви закона дисперсии — *оптическую* и *акустическую*.

§ 26. Фононы

Монохроматической электромагнитной волне с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} можно поставить в соответствие частицу — фотон с энергией $E = \hbar\omega$ и импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Волновая функция фотона с точностью до постоянного множителя представляет собой уравнение электромагнитной волны $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$. Масса покоя фотона равна нулю.

По аналогии с фотонами вводится понятие *фонона* или кванта акустических колебаний. В качестве основания для этого можно привести следующие соображения. Энергия звуковых волн в кристалле квантуется в соответствии с формулой (см. § 12):

$$E_{\text{осц}} = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad (26.1)$$

где $m = 0, 1, 2, 3, \dots$. Формула (26.1) позволяет вычислить энергию квантового гармонического осциллятора. Избыток энергии осциллятора по отношению к нулевой энергии $E_0 = \hbar\omega/2$ равен

$$E_{\text{осц}} - E_0 = m\hbar\omega.$$

Его можно представить в виде потока m квантов, каждый из которых несет энергию $\hbar\omega$.

Фононом называется квазичастица, которая ставится в соответствие монохроматической звуковой волне в кристалле. Энергия E и импульс \mathbf{p} фонона связаны с частотой ω и волновым числом \mathbf{k} звуковой волны следующими соотношениями:

$$E = \hbar\omega, \quad (26.2)$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (26.3)$$

Термин *квазичастица* призван подчеркнуть тот факт, что для существования фонона необходима среда (кристалл). Фонон по существу представляет собой свойство среды, в которой происходит внутреннее движение, вне такой среды он существовать не может. Итак, фонон — это квант акустических колебаний кристаллической решетки.

Рассмотрим основные свойства фононов.

1. Волновая функция фонона. Волновой функцией фонона с точностью до постоянного множителя является уравнение звуковой волны в кристалле:

$$\psi_k(n, t) = \psi_k e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_n)}. \quad (26.4)$$

Взаимосвязь между волновой функцией фонона и звуковыми волнами аналогична взаимосвязи, которая имеет место в случае фотонов и световых волн. Звуковая волна содержит в себе сведения об интенсивности звука и нормируется на полное число фононов: интенсивность звука пропорциональна квадрату амплитуды звуковой волны (см. § 11 в кн. 4 «Колебания и волны. Оптика»); зная интенсивность, можно найти амплитуду волны. Напротив, волновая функция нормируется на один фонон: вероятность обнаружить фонон где бы то ни было в объеме кристаллического образца, вычисляемая как интеграл от квадрата модуля волновой функции фонона, равна единице; из этого соотношения определяется амплитуда волновой функции.

Мы убедились (см. § 25), что внутренние движения атомов кристалла можно рассматривать как наложение монохроматических звуковых волн с различными частотами. В свою очередь систему звуковых волн, распространяющихся по всем направлениям в кристалле, можно рассматривать как заключенный в пределах кристаллического образца фононный газ (аналогично электромагнитное тепловое излучение представлялось как фотонный газ, заполняющий полость в теле (см. гл. VII)). Если амплитуда звуковых колебаний не слишком велика и звуковые волны распространяются независимо друг от друга,

фононный газ можно считать идеальным, то есть газом не взаимодействующих друг с другом фононов. При больших амплитудах звуковые колебания становятся ангармоническими, звуковые волны перестают быть независимыми друг от друга, соответственно увеличивается плотность фононного газа, он перестает быть идеальным. В этом случае необходимо учитывать столкновения фононов.

2. Энергия фонона. Энергия фонона, связанная с частотой ω звуковой волны соотношением $E = \hbar\omega$, изменяется в пределах от нуля до определяемого максимальной частотой звуковой волны в кристалле (25.14) наибольшего возможного значения:

$$E \leq E_{\max} = \hbar\omega_{\max} = 2\hbar\sqrt{\frac{\gamma}{m}}. \quad (26.5)$$

Поскольку частота звуковой волны является периодической функцией волнового вектора (в рассмотренном случае одномерного кристалла — волнового числа (25.13)), энергия фонона является периодической функцией его импульса.

3. Импульс фонона. При изучении звуковых волн было введено понятие первой зоны Бриллюэна: $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$. Значениям k из указанного интервала соответствуют физически различные звуковые волны в кристалле. Поскольку импульс p фонона связан с волновым числом k звуковой волны (см. (26.3)), вводится понятие первой зоны Бриллюэна в пространстве импульсов.

Зоной Бриллюэна называется интервал таких значений импульса p , которым соответствуют физически различные фононы. Первой зоной Бриллюэна называется интервал, выбранный так, что точка $p = 0$ лежит в его центре:

$$-\frac{\hbar\pi}{a} \leq p \leq \frac{\hbar\pi}{a}. \quad (26.6)$$

Все значения импульса p фононов могут быть приведены к значению, лежащим в первой зоне Бриллюэна, путем прибавления величины $2\pi\hbar m/a$, где m — соответствующим образом подобранное целое положительное или отрицательное число или нуль.

Импульс фонона p определен с точностью до величины:

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar m}{a}, \quad (26.7)$$

где $m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$. Если импульс p фонона не принадлежит первой зоне Бриллюэна, то следует выбрать число m таким, чтобы импульс $p' = p + \Delta p$ принадлежал интервалу (26.6).

В связи с неоднозначностью своего значения импульс фонона называют квазиимпульсом. При изучении столкновений между фононами или между фононом и электроном закон сохранения импульса выполняется с точностью до величины $2\pi\hbar m/a$. Это означает, что если в результате столкновения частица приобрела импульс, выходящий за пределы первой зоны Бриллюэна, его необходимо привести в эту зону, добавляя величину $2\pi\hbar m/a$. Закон сохранения энергии при такой

замене не нарушается, поскольку энергия фонона является периодической функцией импульса с периодом $2\pi\hbar/a$.

Физический смысл величины Δp (26.7) заключается в следующем: Δp — это импульс кристалла при его перемещении как единого целого. Докажем это утверждение, используя модель одномерного кристалла. Если кристалл движется как единое целое, смещения $\xi(n, t)$ и $\xi(l, t)$ любых двух атомов, расположенных, например, в узлах решетки с номерами n и l , должны быть одинаковыми:

$$\xi(n, t) = \xi(l, t).$$

Запишем это условие с помощью уравнения волны (25.11):

$$A_k e^{-i(\omega t - kan)} = A_k e^{-i(\omega t - kal)}.$$

Отсюда:

$$ikan = ial + i \cdot 2\pi q,$$

где q — любое целое число.

После преобразований получим равенство:

$$ka(n - l) = 2\pi q,$$

оно выполняется для любых целых n, l, q при условии:

$$k = \frac{2\pi m}{a}, \quad (26.8)$$

где m — целое число. Итак, (26.8) определяет волновое число звуковой волны, которая описывает движение кристалла как целого. Фонон, который ставится в соответствие указанной волне, обладает импульсом:

$$p_{\text{крист}} = \frac{2\pi\hbar m}{a}, \quad (26.9)$$

что совпадает с Δp в (26.7).

Следовательно, вычитая из импульса фонона p величину Δp , определяемую равенством (26.7), и приводя его импульс в первую зону Бриллюэна, мы избавляемся от импульса кристалла как целого. Такая математическая операция означает разделение внутреннего движения атомов кристалла на две составляющие: движение фононов относительно неподвижного кристалла и движение кристалла как целого.

4. Связь импульса со скоростью звука. Учитывая связь импульса с волновым числом $p = \hbar k$ (см. (26.3)) и связь волнового числа k с частотой ω и фазовой скоростью V_ϕ гармонической волны $k = \omega/V_\phi$, импульс p фонона можно представить в следующем виде:

$$p = \frac{\hbar\omega}{V_\phi}. \quad (26.10)$$

Как показано выше (см. (25.20)), фазовая скорость звуковой волны в кристалле V_ϕ при изменении волнового числа k в пределах первой зоны Бриллюэна изменяется приблизительно на 30 % своего максималь-

ного значения; при малых k фазовая скорость практически не зависит от волнового числа и приблизительно равна групповой скорости и обе эти скорости называются скоростью звука s (25.22):

$$V_{\phi} \approx V_{\text{гр}} = s.$$

Учитывая это приближенное равенство и формулу (26.9) и рассматривая тепловые свойства фононного газа, будем полагать, что импульс p фонона связан со скоростью звука s в кристалле соотношением:

$$p = \frac{\hbar\omega}{s}, \quad (26.11)$$

где s — постоянная величина.

5. Спин фонона. В твердых телах звуковые волны могут иметь три различных поляризации: одну продольную и две независимые поперечные. Используя аналогию с фотонами, можно утверждать, что спиновое квантовое число фонона равно единице:

$$s_{\phi} = 1. \quad (26.12)$$

Число проекций спина фонона на направление его распространения равно трем. При этом спиновое квантовое число, определяющее проекцию спина, принимает следующие значения:

$$m_s = -1, 0, +1. \quad (26.13)$$

(Аналогично, электромагнитная волна является поперечной и характеризуется двумя независимыми поляризациями; соответственно, спин фотона равен единице, число проекций спина на направление светового луча равно двум: $m_s = -1, +1$.)

6. Статистика фононного газа. Фонон принадлежит к числу бозонов как частица с целым спином. Полное число частиц фононного газа в объеме кристаллического образца с изменением температуры меняется; химический потенциал μ такой системы частиц равен нулю (аналогично фотонному газу, заключенному в замкнутой полости). Масса покоя фонона равна нулю. Фононный газ описывается статистикой Бозе–Эйнштейна с переменным числом частиц, среднее число фононов в состоянии с энергией E рассчитывается по формуле:

$$n_{\text{фон}} = \frac{1}{e^{E/(\kappa T)} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1}. \quad (26.14)$$

§ 27. Теплоемкость кристаллических решеток

Тепловые колебания кристаллической решетки можно представить как фононный газ, заключенный в объеме кристалла. С помощью этой модели тепловые свойства кристалла, в частности, теплоемкость решетки, можно определить путем изучения тепловых свойств фононного газа. Будем полагать, что амплитуда тепловых колебаний атомов кри-

сталла не слишком велика, так что фононный газ представляет собой систему не взаимодействующих друг с другом частиц (идеальный газ).

Полная энергия фононов в кристалле. Рассчитаем полную энергию фононов $U_{\text{фон}}$ таким же способом, который применялся для расчета полной энергии фотонного газа в замкнутой полости (см. § 24). С этой целью умножим энергию фонона $E = \hbar\omega$ на $n_{\text{фон}}$ — среднее число заполнения одного квантового состояния с энергией E (26.14), затем на величину $g(E)dE$ — число разрешенных квантовых состояний в интервале значений энергии от E до $E + dE$ (см. формулу (21.11), в которой $2J+1$ — число проекций спина фонона — равно трем) и проинтегрируем полученное произведение по переменной E в пределах от нуля до E_{max} — наибольшей возможной энергии фонона в кристалле. В результате получим

$$\begin{aligned} U_{\text{фон}} &= \int_0^{E_{\text{max}}} E n_{\text{фон}}(E) g(E) dE = \int_0^{p_{\text{max}}} \hbar\omega \frac{1}{e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1} \cdot 3 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= \int_0^{\omega_{\text{max}}} \hbar\omega \frac{1}{e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1} \cdot 3 \frac{4\pi (\hbar\omega/s)^2 d(\hbar\omega/s) V}{(2\pi\hbar)^3} = \\ &= \frac{3}{2\pi^2} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} V \int_0^{\omega_{\text{max}}} \frac{(\hbar\omega/(\kappa T))^3 d(\hbar\omega/(\kappa T))}{e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1} = V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \int_0^{x_{\text{max}}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \end{aligned}$$

Здесь V — объем образца кристалла. В процессе преобразований импульс фонона заменили через $p = \hbar\omega/s$, где s — скорость звука, считая s приблизительно постоянной величиной (см. (26.11)). Учли, что верхнему пределу интегрирования E_{max} соответствует величина наибольшего возможного импульса фонона p_{max} и наибольшая возможная частота звуковой волны ω_{max} . Была введена переменная интегрирования $x = \hbar\omega/(\kappa T)$ и соответствующий верхний предел интегрирования $x_{\text{max}} = \hbar\omega_{\text{max}}/(\kappa T)$.

Таким образом, полная энергия фононов в кристалле объемом V при температуре T определяется выражением:

$$U_{\text{фон}} = V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \int_0^{x_{\text{max}}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (27.1)$$

Она зависит от температуры кристалла T и от наибольшей возможной частоты звуковой волны в кристалле ω_{max} . Определение величины ω_{max} требует специального рассмотрения. Очевидно, что полученным выше выражением для ω_{max} (25.14) воспользоваться на практике не представляется возможным, так как неизвестен эмпирический параметр кристаллической решетки γ (коэффициент жесткости пружинки).

Формула (27.1) является приближенной, поскольку получена в предположении постоянства скорости звука s , а это справедливо лишь при малых значениях волнового числа k или импульса p фонона. Кроме того, при выводе (27.1) не учитывалась анизотропия кристалла, которая проявляется, в частности, в различии скоростей продольных и поперечных волн s_{\parallel} и s_{\perp} (обе эти скорости заменены одной величиной s), а также в том, что E_{\max} , p_{\max} , ω_{\max} зависят от направления в кристалле.

Температура Дебая. Температурой Дебая θ_D называется величина, определяемая условием:

$$\chi\theta_D = \hbar\omega_{\max}, \quad (27.2)$$

где ω_{\max} — наибольшая возможная частота звуковых волн в кристалле.

Температура Дебая указывает для каждого вещества ту область, в которой становится существенным квантование энергии колебаний. Если температура много выше θ_D , то тепловые характеристики твердого тела можно рассчитать, опираясь на классическую теорему о равномерном распределении энергии по степеням свободы. При низких температурах ($T \leq \theta_D$) для определения теплоемкости тел необходимо использовать методы квантовой физики.

Согласно (27.2) определение θ_D равносильно определению ω_{\max} — наибольшей возможной частоты звуковой волны в кристалле. Проведем оценку температуры Дебая двумя способами.

1. Всему интервалу частот звуковых волн от нуля до ω_{\max} соответствует интервал энергий квантовых состояний фононов от нуля до E_{\max} . Фононы могут находиться только в таких квантовых состояниях, энергия которых принадлежит указанному интервалу. Полное число удовлетворяющих этому условию квантовых состояний должно быть равно числу внутренних (колебательных) степеней свободы кристалла. Опираясь на эти соображения, определим ω_{\max} .

Если V — объем кристалла, n — число атомов (узлов кристаллической решетки) в единице объема, то число колебательных степеней свободы кристалла равно $3nV$. Число разрешенных квантовых состояний в интервале значений энергии от нуля до E_{\max} определяется

выражением $\int_0^{E_{\max}} g(E) dE$; статистический вес $g(E)$ — формулой (22.11), в которой $2J + 1 = 3$. Приравняем число степеней свободы и число квантовых состояний:

$$3nV = \int_0^{E_{\max}} g(E) dE,$$

$$3nV = \int_0^{p_{\max}} 3 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Заменяв импульс фонона через $p = \hbar\omega/s$ в соответствии с (26.11) и выполнив интегрирование, получим

$$3n = \int_0^{\omega_{\max}} 3 \frac{4\pi(\hbar\omega/s)^2 d(\hbar\omega/s)}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$3n = \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega_{\max}^3}{3}.$$

Отсюда находим ω_{\max} :

$$\omega_{\max} = (6\pi^2 n)^{1/3} s, \quad (27.3)$$

где s — скорость звука в кристалле, n — число атомов в единице объема.

Формула (27.3) представляет собой приближенное выражение для наибольшей возможной частоты колебаний решетки или, что то же самое, наибольшей возможной частоты звуковой волны в кристалле.

2. Воспользуемся справедливым для волн в сплошной упругой среде соотношением (25.2) между частотой ω , постоянной фазовой скоростью V_ϕ (обозначим V_ϕ через s — скорость звука) и волновым числом k :

$$\omega = V_\phi k = sk. \quad (27.4)$$

Подставим в (27.4) наибольшее в пределах первой зоны Бриллюэна значение $k = \pi/a$, где a — период решетки, и определим тем самым наибольшую возможную частоту ω_{\max} :

$$\omega_{\max} = s \frac{\pi}{a} \approx s\pi (n)^{1/3}. \quad (27.5)$$

Для оценки межатомного расстояния a (периода решетки) воспользовались формулой $a \approx 1/\sqrt[3]{n}$, где n — число атомов в единице объема.

Формулы (27.3) и (27.5) для расчета ω_{\max} совпадают по порядку величины. Оценив с их помощью ω_{\max} , можно вычислить параметр θ_D по формуле (27.2).

Приведем опытные значения температуры Дебая θ_D для некоторых веществ (см. табл. 27.1).

Таблица 27.1

Вещество	θ_D , К	Вещество	θ_D , К
Алмаз	1850	Медь	340
Алюминий	375	Кремний	650
Железо	360	Свинец	95

Закон Дюлонга и Пти. В начале XIX в. французскими учеными Дюлонгом (1785–1838) и Пти (1791–1820) было установлено эмпирическое правило (*закон Дюлонга и Пти*), которое с использованием

современной терминологии формулируется следующим образом: молярная теплоемкость при постоянном объеме C_V химического элемента в твердом состоянии приблизительно одинакова для всех элементов и составляет величину, равную $3R$:

$$C_V = 3R. \quad (27.6)$$

Здесь R — универсальная газовая постоянная. С учетом (27.6) теплоемкость твердого тела, отнесенная к единице объема вещества, должна быть равна

$$C_{\text{ед.об}} = \frac{n}{N_A} C_V = 3n\kappa, \quad (27.7)$$

где n — число атомов в единице объема, N_A — число Авогадро, κ — постоянная Больцмана.

Закон Дюлонга и Пти находит простое объяснение в классической теории теплоемкостей, основанной на теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы молекул. Теплоемкость кристаллической решетки рассчитывается следующим способом. Пусть в единице объема кристалла содержится n атомов. Каждый атом обладает тремя колебательными степенями свободы, на каждую из которых приходится средняя энергия κT . Тогда внутренняя энергия единицы объема кристалла равна

$$U = 3n\kappa T.$$

Теплоемкость кристалла, отнесенная к единице объема, составит величину

$$C_{\text{ед.об}} = \frac{dU}{dT} = 3n\kappa,$$

что совпадает с (27.7).

Как следует из опыта, закон Дюлонга и Пти выполняется лишь при сравнительно высоких температурах. При низких температурах теплоемкость кристаллов убывает, стремясь к нулю при приближении к нулю абсолютной температуры тела. Для объяснения такой зависимости теплоемкости от температуры необходимо привлекать методы квантовой физики.

Квантовая теория решеточной теплоемкости. Теория теплоемкости Дебая может быть рассмотрена с использованием формулы (27.1) для полной энергии фононов в кристаллическом образце. Мы ограничимся рассмотрением только двух предельных случаев: 1) случай низких температур ($T \ll \theta_D$), 2) случай высоких температур ($T \gg \theta_D$).

Внутренняя энергия U кристаллической решетки складывается из полной энергии фононов $U_{\text{фон}}$ (27.1) и суммарной нулевой энергии гармонических осцилляторов U_0 (напомним, что внутренние движения кристалла можно рассматривать как колебания системы гармонических

осцилляторов, каждый из которых характеризуется нулевой энергией, см. § 12):

$$U = U_0 + U_{\text{фон}} = U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \int_0^{x_{\text{max}}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (27.8)$$

где $x = \hbar\omega/\kappa T$, $x_{\text{max}} = \hbar\omega_{\text{max}}/\kappa T$. Нулевая энергия U_0 не зависит от температуры и не будет сказываться на величине теплоемкости решетки.

С л у ч а й 1. Пусть температура T кристалла много ниже температуры Дебая:

$$T \ll \theta_D. \quad (27.9)$$

Отсюда с учетом (27.2) следует:

$$\begin{aligned} \kappa T &\ll \kappa \theta_D = \hbar\omega_{\text{max}}, \\ \frac{\hbar\omega_{\text{max}}}{\kappa T} &= x_{\text{max}} \gg 1. \end{aligned} \quad (27.10)$$

Учитывая соотношение (27.10), положим верхний предел интегрирования в выражении (27.8) для энергии решетки равным бесконечности: $x_{\text{max}} \approx \infty$ и вычислим интеграл. Тогда энергия решетки будет равна:

$$\begin{aligned} U = U_0 + U_{\text{фон}} &= U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \\ &= U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \frac{\pi^4}{15} = U_0 + V \frac{\pi^2}{10} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3}. \end{aligned} \quad (27.11)$$

Дифференцируя обе части равенства (27.11) по температуре и разделив на объем образца V , определим теплоемкость решетки, отнесенную к единице объема кристалла:

$$C_{\text{ед.об.реш}} = \frac{1}{V} \frac{dU}{dT} = \frac{2\pi^2}{5} \frac{\kappa^4 T^3}{\hbar^3 s^3}. \quad (27.12)$$

Из (27.12) следует, что при низких температурах решеточная теплоемкость зависит от T по степенному (кубическому) закону, стремясь к нулю при приближении температуры T к абсолютному нулю. Эта зависимость известна как *закон T^3 Дебая*.

2. Определим теплоемкость решетки при высоких температурах:

$$T \gg \theta_D. \quad (27.13)$$

Отсюда с учетом (27.2) следует:

$$\begin{aligned} \kappa T &\gg \kappa \theta_D = \hbar\omega_{\text{max}}, \\ \frac{\hbar\omega_{\text{max}}}{\kappa T} &= x_{\text{max}} \ll 1. \end{aligned} \quad (27.14)$$

Переменная интегрирования x в подинтегральном выражении (27.8) с учетом (27.14) удовлетворяет неравенству:

$$x \leq x_{\max} \ll 1$$

Раскладывая в подинтегральном выражении (27.8) экспоненту в ряд по малому параметру x и ограничиваясь двумя членами разложения: $e^x \approx 1 + x$, вычислим внутреннюю энергию решетки

$$\begin{aligned} U &= U_0 + U_{\text{фон}} = U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\varkappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \approx \\ &\approx U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\varkappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{1 + x - 1} = U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\varkappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \frac{x_{\max}^3}{3} = \\ &= U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\varkappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \frac{x_{\max}^3}{3} = U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\varkappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \frac{\hbar^3 \omega_{\max}^3}{3 \varkappa^3 T^3} = \\ &= U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\varkappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \frac{\hbar^3 ((6\pi^2 n)^{1/3} V)^3}{3 \varkappa^3 T^3} = U_0 + 3n \varkappa T V. \quad (27.15) \end{aligned}$$

В процессе преобразований для ω_{\max} была использована формула (27.3). Дифференцируя обе части равенства (27.15) по температуре и разделив на объем образца V , определим теплоемкость решетки, отнесенную к единице объема кристалла:

$$C_{\text{ед. об. реш}} = \frac{1}{V} \frac{dU}{dT} = 3n \varkappa. \quad (27.16)$$

Выражение (27.16) полностью соответствует классическому закону Дюлонга и Пти (см. (27.7)). Таким образом, теплоемкость кристаллической решетки, рассчитанная методами классической и квантовой физики, в предельном случае высоких температур оказывается одинаковой.

Теория Дебая, основанная на использовании формулы (27.1), позволяет рассчитать теплоемкость решетки во всем температурном диапазоне (см. рис. 65). Рассчитанная по теории Дебая теплоемкость как функция температуры хорошо аппроксимирует соответствующую экспериментальную зависимость для многих веществ (свинца, поваренной соли, алмаза и др.). График, представленный на рис. 69, показывает, что классическая формула для теплоемкости кристалла (27.7) применима не только при условии $T \gg \theta_D$, но и при $T \approx \theta_D$. В этом случае теплоемкость кристалла всего на 5 % отличается от классического значения.

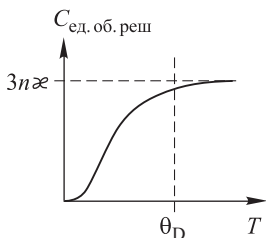


Рис. 69

ла для теплоемкости кристалла (27.7) применима не только при условии $T \gg \theta_D$, но и при $T \approx \theta_D$. В этом случае теплоемкость кристалла всего на 5 % отличается от классического значения.

Теплопроводность кристаллической решетки. Тепловые потоки в кристаллах возникают при наличии градиента температуры (см. § 32 в кн. 2 «Молекулярная физика и термодинамика»). При использовании модели фононного газа для описания тепловых свойств кристаллической решетки необходимо считать, что перенос энергии из одной области кристаллического образца в другую, обусловленный разностью температур, осуществляется благодаря диффузии фононов. Для оценки теплопроводности кристаллической решетки в этом случае можно воспользоваться формулой коэффициента теплопроводности газов (см. там же § 34):

$$\kappa = \frac{1}{3} s \lambda C_{\text{ед.об.реш}},$$

где s — скорость звука, $C_{\text{ед.об.реш}}$ — теплоемкость решетки, отнесенная к единице объема кристалла, λ — средняя длина свободного пробега фононов.

При низких температурах энергия тепловых колебания мала, столкновения фононов друг с другом практически не происходят, поэтому длина свободного пробега определяется столкновениями фононов с примесями, дефектами кристалла, а также ограничивается размерами самого кристаллического образца. Наибольшая возможная длина свободного пробега λ в этих условиях порядка нескольких миллиметров. При повышении температуры амплитуда и энергия тепловых колебаний возрастают, колебания становятся ангармоническими, что соответствует увеличению числа столкновений фононов друг с другом в результате повышения плотности фононного газа. При столкновениях происходит разделение или слияние фононов, имеют место также столкновения фононов с сохранением числа участвующих частиц. В этих процессах выполняется закон сохранения энергии, а закон сохранения импульса верен с точностью до слагаемого $\Delta p = 2\pi\hbar m/a$ (см. формулу (26.7)). Длина свободного пробега фонона λ при повышении температуры уменьшается.

Задачи

8.1. Считая, что скорости распространения продольных и поперечных колебаний одинаковы и равны V , определить дебаевскую температуру:

- а) для одномерного кристалла — цепочки из одинаковых атомов, содержащей n_0 атомов на единицу длины;
- б) для двумерного кристалла — плоской квадратной решетки из одинаковых атомов, содержащей n_0 атомов на единицу площади;
- в) для простой кубической решетки из одинаковых атомов, содержащей n_0 атомов на единицу объема.

8.2. В одномерной цепочке, составленной из одинаковых атомов, скорость звука равна $s = 2 \cdot 10^3$ м/с, постоянная решетки $a = 0,3$ нм.

При какой частоте колебаний ω сдвиг фаз между двумя атомами, находящимися на расстоянии $10a$, составит $\pi/2$?

8.3. Каково отношение числа фононов с дебаевской частотой $\omega_D = k\theta_D/\hbar$ к числу фононов с частотой $\omega_D/2$ в кристалле, описываемом моделью Дебая, при температурах $T_1 = \theta_D$ и $T_2 = \theta_D/10$?

8.4. Определить в дебаевской модели отношение теплоемкостей образцов бериллия Ве и меди Си одинакового объема при $T = 300$ К. Плотности бериллия и меди соответственно равны $\rho_{\text{Ве}} = 1,8 \cdot 10^3$ кг/м³ и $\rho_{\text{Си}} = 8,9 \cdot 10^3$ кг/м³, температуры Дебая $\theta_{\text{Ве}} = 1440$ К и $\theta_{\text{Си}} = 340$ К.

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

§ 28. Энергетические зоны в кристаллах. Проводники и изоляторы

Как тепловые, так и электрические характеристики кристаллических твердых тел в значительной степени зависят от свойств имеющих в них электронов. При образовании кристалла в результате объединения огромного числа атомов свойства атомных электронов, которые рассматривались в гл. V, существенно изменяются. Атомы близко подходят друг к другу и не могут рассматриваться как независимые. Данная глава посвящена изучению свойств электронов в кристаллах.

Энергетические зоны. *Разрешенной зоной* называется интервал значений энергии, которой может обладать электрон в кристалле.

Запрещенные зоны — это энергетические промежутки, отделяющие разрешенные зоны друг от друга. Электрон в кристалле не может обладать энергией, значение которой принадлежит запрещенной зоне.

Разрешенные зоны кристалла возникают из атомных уровней энергии. Образование зон происходит во всех кристаллах, независимо от их типа. Различие между кристаллами состоит в различном расположении зон и характере их заполнения электронами.

Квантовому состоянию электрона в атоме соответствует определенная энергия — атомный уровень. Если два атома расположены близко друг от друга (так, что волновые функции электронов соседних атомов перекрываются), то каждый атомный уровень энергии «расщепляется» на два подуровня. Обычно расщепление (расстояние между подуровнями) оказывается существенно меньше, чем расстояние между соседними невозмущенными атомными уровнями. При взаимодействии трех атомов из каждого атомного уровня образуется три подуровня. Можно доказать, что в системе из N взаимодействующих между собой атомов имеет место расщепление каждого атомного уровня энергии на N подуровней. Так, в кристаллическом образце, содержащем один моль вещества, каждый из атомных уровней расщепится приблизительно на $6 \cdot 10^{23}$ подуровней. Следует иметь в виду, что атомные уровни имеют конечную ширину, и что расстояние между подуровнями оказывается меньше их ширины. Расположенные близко друг от друга подуровни образуют сплошную полосу ширины ΔE , которая называется разрешенной зоной. Распределение электронов по энергиям в пределах указанной полосы является непрерывным.

Зону, образовавшуюся в результате расщепления какого-либо уровня, принято обозначать также, как и сам уровень: на первом месте пишется значение главного квантового числа n , на втором — значение азимутального квантового числа l . Например, обозначение $2s$ указывает, что зона образовалась из атомного уровня с квантовыми числами $n = 2$ и $l = 0$.

К основным свойствам разрешенных зон можно отнести следующие.

Свойство 1. Число квантовых состояний электронов в разрешенной зоне равно кратности вырождения атомного уровня энергии, из которого возникла зона, умноженной на полное число атомов в кристалле.

Число квантовых состояний электрона в атоме можно рассматривать как число его внутренних электронных степеней свободы. При образовании кристалла сближение атомов друг с другом приводит к постепенному изменению энергии атомных уровней, уровни в разрешенных зонах многократно перекрываются и образуют сплошной энергетический интервал. Однако это не ведет к изменению числа степеней свободы, которое является дискретной величиной и может изменяться только скачкообразно. Полное число электронных степеней свободы кристалла равно сумме соответствующих степеней свободы всех атомов, откуда и следует свойство 1.

Состояние электрона в атоме определяется любым набором из четырех независимых квантовых чисел, например, n , l , m_l , m_s . Энергия многоэлектронного атома зависит от двух квантовых чисел n и l (с точностью до тонкого расщепления). Атомному уровню $2s$ соответствуют два различных квантовых состояния, отличающихся только проекциями спина ($m_s = \pm 1/2$), поэтому в кристалле из N одинаковых атомов разрешенная зона $2s$ содержит $2N$ квантовых состояний. Атомному уровню $5d$ соответствуют десять различных квантовых состояний (каждому из пяти возможных значений $m_l = 0, \pm 1, \pm 2$ отвечают два значения $m_s = \pm 1/2$), поэтому в кристалле из N одинаковых атомов разрешенная зона $5d$ содержит $10N$ квантовых состояний.

Свойство 2. Поскольку электроны являются фермионами и подчиняются принципу Паули, число электронов в разрешенной зоне не может превзойти числа имеющихся в ней квантовых состояний, называемых иначе вакансиями.

Свойство 3. Низко расположенные уровни энергии, соответствующие квантовым состояниям электронов внутренних электронных слоев атома, в твердом теле превращаются в очень узкие зоны, а высоко расположенные уровни, соответствующие квантовым состояниям внешних электронов атома, образуют зоны большой ширины. В этом проявляется более сильное взаимодействие с окружающими атомами внешних электронов данного атома по сравнению с его внутренними электронами.

Свойство 4. Кристаллические вещества, способные проводить электрический ток, отличаются от изоляторов тем, что в них имеются

носители тока — заряженные частицы (электроны), которые под действием внешнего электрического поля перемещаются по всему объему кристалла. Носителями тока в кристалле могут служить только те электроны, энергия которых принадлежит а) обобществленной; б) частично заполненной разрешенной зоне (необходимым является наличие обоих указанных условий). Частично заполненные разрешенные зоны называются *зонами проводимости*.

Рисунки 70 и 71 иллюстрируют различие между изолированными и обобществленными электронами. На рис. 70 приведен график функции потенциальной энергии электрона в кулоновском поле атомного ядра или положительного иона с зарядом $Z|e|$: $U_{\text{ат}}(r) = -kZe^2/r^2$, где r — расстояние между ядром и электроном; здесь же показаны атомные уровни энергии. Таким образом, в изолированном атоме уровни энергии находятся в потенциальной яме, форма стенок которой описывается приведенной функцией потенциальной энергии $U_{\text{ат}}(r)$. При сближении атомов и образовании кристалла пространственная зависимость потенциальной энергии электрона претерпевает изменения.

Пусть кристалл представляет собой линейную цепочку одинаковых расположенных на расстоянии a друг от друга атомов (рис. 71 а).

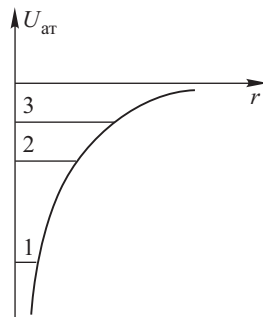


Рис. 70

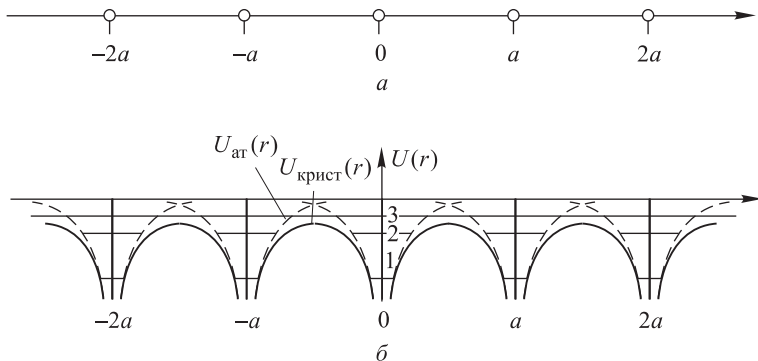


Рис. 71

В кристалле электрон, удаляясь от своего атомного ядра, приближается к ядру соседнего атома, в результате взаимодействия с которым потенциальная энергия понижается по сравнению с энергией электрона в изолированном атоме (на рис. 71 б сравните штриховые линии потенциальной энергии электрона в изолированном атоме $U_{\text{ат}}$ и сплошные линии потенциальной энергии электрона в кристалле $U_{\text{крист}}$). Потенци-

альные ямы соседних атомов в их верхней части сливаются, образуя максимумы потенциальной энергии. Из атомного уровня (обозначен цифрой 3 на рисунках 70 и 71 б), энергия которого больше потенциальной энергии $U_{\text{крист}}(r)$ в точках максимума, возникает обобществленная зона. Атомные уровни, которые расположены в потенциальной яме глубоко (обозначены цифрами 1 и 2 на рисунках 70 и 71 б), при сближении атомов превращаются в относительно узкие зоны, отделенные от других атомов стенками потенциальной ямы. Электроны нижних зон не участвуют в электропроводимости, так как они «привязаны» к своим атомам.

Энергия электрона обобществленной зоны выше потенциальной энергии $U_{\text{крист}}(r)$ в точках ее максимума, поэтому электрон свободно перемещается по кристаллу, отражаясь от его краев. Движение электрона в этом случае напоминает обычное движение в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, роль которых играют границы кристалла (см. § 9). В отличие от случая, рассмотренного в § 9, дно ямы имеет сложный рельеф, наличие которого определяет особенности волновой функции электрона (волна Блоха, см. § 29).

Если зона заполнена, электроны зоны не могут участвовать в электропроводимости, даже если зона лежит высоко и электроны обобществлены. Перемещение электрона по кристаллу представляет собой непрерывную последовательность переходов из одного квантового состояния в другое. Если все состояния заняты (зона заполнена), такие переходы становятся невозможными.

Зонная структура некоторых кристаллических проводников и изоляторов. Обозначим через N полное число атомов кристалла.

Пример 1. Кристаллы одновалентных химических элементов являются проводниками. К таковым относятся кристаллы лития (Li), натрия (Na), калия (K), меди (Cu) и др. Рассмотрим зонную структуру кристалла лития.

Электронная конфигурация изолированного атома лития $1s^2 2s^1$. Из атомных уровней $1s$ и $2s$ образуются разрешенные зоны с теми же обозначениями (рис. 72). На рисунке стрелками условно обозначены: два электрона $1s$ -оболочки и один электрон $2s$ -оболочки.

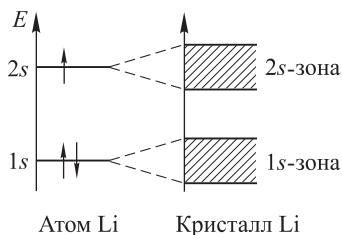


Рис. 72

Заполнение разрешенных зон следующее. Зона $1s$: число квантовых состояний $2N$, число электронов $2N$, зона заполнена. Зона $2s$: число квантовых состояний $2N$, число электронов N , зона заполнена частично и является зоной проводимости.

Пример 2. Кристаллы двухвалентных химических элементов: бериллия (Be), магния (Mg) и др. являются проводниками.

Электронная конфигурация изолированного атома бериллия $1s^2 2s^2$. Все квантовые состояния электронных оболочек, в которых имеются электроны, заполнены. Из опыта известно, что в кристалле бериллия разрешенные зоны, образованные из атомных уровней $2s$ и $2p$, частично перекрываются, образуя общую $2s-2p$ -разрешенную зону (рис. 73).

Заполнение разрешенных зон следующее. Зона $1s$: число квантовых состояний $2N$, число электронов $2N$, зона заполнена. Объединенная зона $2s-2p$: число квантовых состояний $8N$ ($2N$ состояний зоны $2s$ и $6N$ состояний зоны $2p$), число электронов $2N$ (электроны атомной оболочки $2s$), зона заполнена частично и является зоной проводимости.

Пример 3. Кристалл поваренной соли NaCl является изолятором.

Электронная конфигурация изолированных атомов натрия: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, хлора: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$. Взаимное расположение самых верхних атомных уровней изолированных атомов натрия и хлора показано на рис. 74. Из опыта известно, что в кристалле NaCl взаимное расположение разрешенных зон $3s$ и $3p$ изменяется на противоположное по сравнению с изолированными атомами: зона $3p$ оказывается ниже зоны $3s$ (рис. 74 б). Все валентные электроны атомов натрия и хлора — пять электронов оболочки $3p$ хлора и один электрон оболочки $3s$ натрия — в кристалле занимают состояния с наименьшей энергией и располагаются в зоне $3p$.

Заполнение разрешенных зон кристалла NaCl следующее. Зона $3p$: число квантовых состояний $6N$, число электронов $6N$ (пять электронов оболочки $3p$ каждого атома хлора и один электрон оболочки $3s$ каждого атома натрия), зона заполнена. Электроны заполненной зоны $3p$ не могут служить носителями тока. Следующая разрешенная зона $3s$ пуста. Кристалл поваренной соли является изолятором.

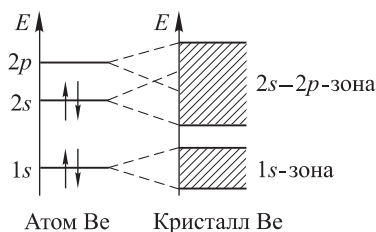


Рис. 73

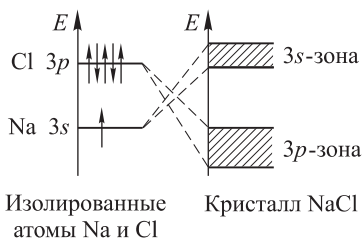


Рис. 74

§ 29. Волны Блоха

Потенциальная энергия электрона в электрическом поле кристаллической решетки. Электроны в кристаллическом проводнике можно разделить на два класса: а) *внутренние электроны атомной*

электронной оболочки, сильно связанные с атомами и не способные перемещаться по кристаллу; б) *обобществленные электроны*, связь которых с атомами относительно слаба, что позволяет им свободно переходить от одного атома к другому; это внешние валентные электроны атомов. Обобществленные электроны служат носителями электрического тока и называются *электронами проводимости*.

Исследуем свойства волновой функции обобществленных электронов, ограничившись рассмотрением модели одномерного кристалла — бесконечной прямолинейной цепочки одинаковых атомов, находящихся на одинаковом расстоянии a друг от друга. Координатную ось x направим вдоль линии расположения атомов.

Потенциальная энергия электрона в кулоновском поле ядра или положительного иона с зарядом $Z|e|$ описывается функцией:

$$U_{\text{ат}}(r) = -\frac{kZe^2}{r}, \quad (29.1)$$

где r — расстояние между ядром и электроном, e — заряд электрона, Z — заряд ядра в единицах элементарного заряда, $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$ — коэффициент пропорциональности в системе СИ (см. рис. 70). Электрическое поле кристалла — это поле решетки, в узлах которой располагаются положительно заряженные ионы, а остальное пространство кристалла заполнено газом почти свободных обобществленных электронов. Потенциальная энергия электрона $U(x)$ вблизи каждого узла решетки может быть выражена формулой, подобной (29.1), а если брать кристалл в целом, то $U(x)$ является периодической функцией координаты x с периодом a :

$$U(x + a) = U(x). \quad (29.2)$$

Примерный вид графика функции $U(x)$ в кристалле показан на рис. 75. Здесь же изображены уровни энергии сильно связанных с ато-

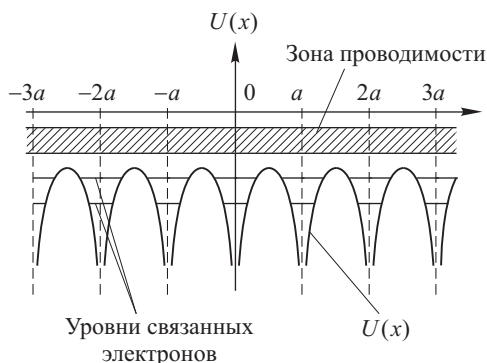


Рис. 75

мами электронов, которые в кристалле несколько шире по сравнению с соответствующими атомными уровнями; показана также разрешенная зона, содержащая обобществленные электроны (зона проводимости).

В случае трехмерного кристалла функция потенциальной энергии электрона $U(\mathbf{r})$ также является периодической:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r}), \quad (29.3)$$

где \mathbf{a} — так называемый *вектор трансляции*, равный сумме базисных векторов элементарной ячейки кристаллической решетки.

Решение уравнения Шредингера. Пусть $\psi(x)$ — волновая функция электрона, $U(x)$ — его потенциальная энергия в периодическом электрическом поле кристаллической решетки, удовлетворяющая условию (29.2), E — полная энергия электрона, m — его масса. Стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (29.4)$$

Умножим это уравнение на $2m/\hbar^2$ и введем обозначение:

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] = \kappa^2(x). \quad (29.5)$$

Уравнение Шредингера примет вид

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \kappa^2(x)\psi = 0. \quad (29.6)$$

В силу периодичности кристалла и условия (29.2):

$$\kappa^2(x + a) = \kappa^2(x). \quad (29.7)$$

Линейные дифференциальные уравнения второго порядка с периодическими коэффициентами называются *уравнениями Матрё* и, вообще говоря, не решаются в аналитических функциях. Однако можно установить общие свойства решений, которые важны для понимания поведения электронов в кристалле.

Докажем, что среди решений (29.6) имеются два независимых решения $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$, которые при замене x на $x + a$ умножаются на некоторое число λ :

$$\Phi_{1,2}(x + a) = \lambda \Phi_{1,2}(x). \quad (29.8)$$

Там, где это возможно, будем опускать индексы при искомым решениях $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$. Сначала докажем, что если $\Phi(x)$ — решение (29.6), то $\Phi(x + a)$ — также решение. Учтем, что

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{d(x+a)} \frac{d(x+a)}{dx} = \frac{d}{d(x+a)},$$

аналогично:

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d^2}{d(x+a)^2}. \quad (29.9)$$

Пусть $\Phi(x)$ — решение (29.6), тогда имеет место равенство:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \varkappa^2(x)\Phi(x) = 0,$$

при замене переменной x на $x + a$ равенство сохраняется:

$$\frac{d^2\Phi(x+a)}{d(x+a)^2} + \varkappa^2(x+a)\Phi(x+a) = 0.$$

Отсюда с учетом (29.7) и (29.9):

$$\frac{d^2\Phi(x+a)}{d(x)^2} + \varkappa^2(x)\Phi(x+a) = 0.$$

Следовательно, $\Phi(x+a)$ — также решение (29.6), что и требовалось доказать.

Теперь для доказательства (29.8) достаточно показать, что существуют два решения (29.6), у которых начальные условия, то есть значения самой функции и ее первой производной в некоторой точке $x = x_0$, при замене x на $x + a$ одновременно умножаются на число λ :

$$\Phi(x_0 + a) = \lambda\Phi(x_0), \quad \Phi'(x_0 + a) = \lambda\Phi'(x_0), \quad (29.10)$$

Пусть $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ — два произвольных независимых решения уравнения (29.6). Тогда всякое решение уравнения (29.6), в том числе, искомые решения $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$, могут быть представлены в виде линейной комбинации этих двух решений. Снова опуская индекс при искомом решении, запишем:

$$\Phi(x) = b_1\psi_1(x) + b_2\psi_2(x). \quad (29.11)$$

Всегда можно выбрать в качестве $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ такие решения, которые в точке x_0 обладают свойством:

$$\psi_1(x_0) = 1, \quad \psi_1'(x_0) = 0, \quad \psi_2(x_0) = 0, \quad \psi_2'(x_0) = 1. \quad (29.12)$$

(В этом случае $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ образуют так называемую *фундаментальную систему решений*.) Штрихи означают производную по x . Подставляя эти значения в (29.11), найдем начальные значения $\Phi(x)$ и ее производной:

$$\Phi(x_0) = b_1, \quad \Phi'(x_0) = b_2. \quad (29.13)$$

С учетом представления $\Phi(x)$ в виде (29.11) выразим значения функции Φ и ее производной в точке $x_0 + a$:

$$\begin{aligned} \Phi(x_0 + a) &= b_1\psi_1(x_0 + a) + b_2\psi_2(x_0 + a), \\ \Phi'(x_0 + a) &= b_1\psi_1'(x_0 + a) + b_2\psi_2'(x_0 + a). \end{aligned} \quad (29.14)$$

Подставим (29.13) и (29.14) в условия (29.10), которые мы накладываем на искомые решения уравнения Матё:

$$\begin{aligned} b_1\psi_1(x_0 + a) + b_2\psi_2(x_0 + a) &= \lambda b_1, \\ b_1\psi'_1(x_0 + a) + b_2\psi'_2(x_0 + a) &= \lambda b_2. \end{aligned} \quad (29.15)$$

Система (29.15) однородна относительно неизвестных коэффициентов b_1 и b_2 и имеет решения тогда и только тогда, когда ее детерминант равен нулю:

$$\begin{vmatrix} \psi_1(x_0 + a) - \lambda & \psi_2(x_0 + a) \\ \psi'_1(x_0 + a) & \psi'_2(x_0 + a) - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (29.16)$$

Уравнение (29.16) является квадратным относительно λ и определяет два решения λ_1 и λ_2 . Для каждого из них система (29.16) может быть разрешена и определяет (с точностью до постоянного множителя) два набора решений b'_1 , b'_2 и b''_1 , b''_2 . Подставляя эти значения в (29.11), получим функции $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$, определенные с точностью до постоянного множителя. Это и есть искомые функции, существование которых, таким образом, доказано. Решения $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$ линейно независимы, с их помощью можно представить общее решение уравнения (29.6) в виде

$$\psi = c_1\Phi_1(x) + c_2\Phi_2(x), \quad (29.17)$$

где c_1 и c_2 — произвольные постоянные коэффициенты.

Исследуем уравнение (29.16), раскрыв детерминант:

$$\begin{aligned} \lambda^2 - \lambda[\psi_1(x_0 + a) + \psi'_2(x_0 + a)] + \\ + [\psi_1(x_0 + a)\psi'_2(x_0 + a) - \psi'_1(x_0 + a)\psi_2(x_0 + a)] = 0. \end{aligned} \quad (29.18)$$

Выражение во второй квадратной скобке равно единице. Действительно, оно равно значению, которое принимает в точке $x_0 + a$ функция

$$f(x) = \psi_1(x)\psi'_2(x) - \psi'_1(x)\psi_2(x).$$

Производная этой функции равна нулю:

$$\begin{aligned} f'(x) &= \psi_1(x)\psi''_2(x) - \psi''_1(x)\psi_2(x) = \\ &= -\psi_1(x)\varkappa^2(x)\psi_2(x) + \varkappa^2(x)\psi_1(x)\psi_2(x) = 0. \end{aligned}$$

При вычислениях воспользовались тем, что функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ являются решениями уравнения (29.6). Следовательно, функция $f(x)$ — константа. С помощью (29.12) нетрудно убедиться, что $f(x) = 1$ в точке $x = x_0$, а следовательно, и при любых значениях x .

Уравнение (29.18) принимает вид

$$\lambda^2 - \lambda[\psi_1(x_0 + a) + \psi'_2(x_0 + a)] + 1 = 0. \quad (29.19)$$

Введем обозначение

$$2L = \psi_1(x_0 + a) + \psi'_2(x_0 + a). \quad (29.20)$$

Константа L называется *постоянной Ляпунова* (1857–1918). Тогда вместо (29.19) имеем

$$\lambda^2 - 2L\lambda + 1 = 0. \quad (29.21)$$

Корни (29.21) находятся по формуле:

$$\lambda_{1,2} = L \pm \sqrt{L^2 - 1}. \quad (29.22)$$

Рассмотрим случай, когда $|L| > 1$. Тогда оба корня λ_1 и λ_2 вещественны и по модулю один больше, а другой меньше единицы, так как $\lambda_1\lambda_2 = 1$. Из уравнения $\Phi(x+a) = \Phi(x)$ следует, что при $x \rightarrow \infty$ одна из функций $\Phi_1(x)$ или $\Phi_2(x)$ неограниченно возрастает, а при $x \rightarrow -\infty$ неограниченно возрастает другая. В силу этого при $|L| > 1$ ни одно из решений $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$ или их произвольная линейная комбинация с постоянными коэффициентами (29.17) не может быть волновой функцией электрона в кристалле. Значение L определяется функцией $\kappa(x)$, то есть в конечном счете параметром E в уравнении (29.6) — энергией электрона. Следовательно, в кристалле не существует состояний с энергией E , для которых $|L| > 1$. Такие значения энергии E образуют *запрещенные зоны*.

При $|L| \leq 1$ удобно положить

$$L = \cos \nu, \quad (29.23)$$

где ν — новая константа. При этом имеем

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm i\nu}. \quad (29.24)$$

В этом случае решения $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$ при замене x на $x+a$ не изменяют своей величины, а умножаются на фазовый множитель (29.24). Значит, в случае $|L| \leq 1$ искомые решения уравнения (29.6) существуют, а соответствующие значениям $|L| \leq 1$ значения параметра E — энергии электрона — соответствуют *разрешенной зоне*.

Полученные результаты позволяют утверждать, что зонная структура кристалла, наличие разрешенных и запрещенных энергетических зон является следствием уравнения Шредингера (29.6). Исследуем свойства решений этого уравнения.

Поскольку функции $\Phi_1(x)$ и $\Phi_2(x)$ при замене x на $x+a$ не изменяют своей величины, а умножаются соответственно на множители $e^{\pm i\nu}$, они должны иметь следующий вид:

$$\Phi_{1,2} = P_{1,2}(x)e^{\pm ikx}, \quad (29.25)$$

где число k выбрано так, что:

$$k = \frac{\nu}{a}. \quad (29.26)$$

Множитель $e^{\pm ikx}$ в (29.5) обеспечивает нужное изменение Φ при замене x на $x+a$ (умножение на $\lambda_{1,2} = e^{\pm i\nu}$). Функция $P_{1,2}(x)$ должна поэтому возвращаться к своему исходному значению, то есть быть

периодической с периодом a . Квадрат модуля функции $P_{1,2}(x)$ определяет изменение электронной плотности в пределах элементарной ячейки кристалла. Принято говорить, что функция $P_{1,2}(x)$ модулирует по амплитуде и фазе плоскую волну, которая описывается экспоненциальным множителем в (29.25).

Если еще учесть временной множитель $e^{-i\omega t}$, то возможные полные волновые функции электрона в кристалле в отсутствие внешних силовых полей представляются в виде

$$\begin{aligned}\Psi_1(x, t) &= P_1(x)e^{-i(\omega t - kx)}, \\ \Psi_2(x, t) &= P_2(x)e^{-i(\omega t + kx)}.\end{aligned}\quad (29.27)$$

Итак, функции (29.27) представляют собой решения уравнения Шредингера (29.6) для обобществленного электрона в кристалле. Они описывают почти свободное движение электрона, когда все действующие на него силы ограничены взаимодействиями с ионами кристаллической решетки и остальными электронами, а внешних силовых полей нет. Эти функции называются *волнами Блоха* (р. 1905 г.). В отличие от плоских волн де Бройля, распространяющихся в свободном пространстве, в волнах Блоха величины $P_1(x)$ и $P_2(x)$ не постоянны, а периодически меняются вдоль цепочки атомов с периодом a . В трехмерных кристаллах волна Блоха имеет тот же вид, что и (29.27), только $P(x)$ заменяется на функцию $P(\mathbf{r})$, обладающую той же периодичностью, что и сама решетка, а волновое число k — на волновой вектор \mathbf{k} .

В плоской волне Блоха

$$\Psi(x, t) = P(x)e^{-i(\omega t - kx)} \quad (29.28)$$

волновое число k определено не однозначно. Но причина этого другая, чем в случае звуковой волны в кристаллической решетке, где периодичность по k связана с дискретностью значений, которые может принимать координата x (см. § 25). В волне Блоха можно всегда изменить постоянную k и функцию $P(x)$ так, чтобы при этом волновая функция (29.28) осталась неизменной. Действительно, сделаем замену:

$$\tilde{k} = k + \frac{2\pi}{a}, \quad \tilde{P}(x) = P(x)e^{i(2\pi/a)x}.$$

(Вместо слагаемого $2\pi/a$ можно взять любое кратное ему число $2\pi m/a$, где m — целое.) Тогда (29.28) преобразуется в функцию:

$$\tilde{\Psi}(x, t) = e^{i(2\pi/a)x}\Psi(x, t) = \tilde{P}(x)e^{-i(\omega t - \tilde{k}x)}, \quad (29.29)$$

то есть в волну с другим волновым числом \tilde{k} и другой периодически изменяющейся амплитудой $\tilde{P}(x)$. При этом постоянная Ляпунова не изменится:

$$L' = \cos \nu' = \cos k'a = \cos(ka + 2\pi) = \cos ka = \cos \nu = L.$$

Волны (29.29) и (29.28) физически не отличаются друг от друга, поскольку их амплитуды по модулю одинаковы: $|\tilde{P}(x)| = |P(x)|$.

Зоны Бриллюэна. Результаты решения уравнения Шредингера (29.6) и свойства волны Блоха подтверждают общее положение, согласно которому в кристаллах многие физические величины являются периодическими функциями волнового числа k и квазиимпульса $p = \hbar k$. Значения k принято приводить к первой зоне Бриллюэна:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}, \quad (29.30)$$

где a — период решетки.

Импульсом электрона в кристалле, волновая функция которого описывается волной Блоха (29.28), называется величина:

$$p = \hbar k. \quad (29.31)$$

В трехмерном случае $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, где \mathbf{k} — волновой вектор.

Импульс p определен не однозначно, а с точностью до величины:

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar m}{a}, \quad (29.32)$$

где m — целое число, и потому называется *квазиимпульсом*. Значения p принято приводить к первой зоне Бриллюэна в пространстве импульсов:

$$-\frac{\hbar\pi}{a} \leq p \leq \frac{\hbar\pi}{a}. \quad (29.33)$$

В столкновениях с участием электронов и других частиц в кристалле закон сохранения импульса выполняется с точностью до величины (29.32).

Различным значениям волнового числа k (импульса p) из первой зоны Бриллюэна соответствуют физически различные волны Блоха.

Справедливо следующее утверждение: переходы из разрешенной зоны в запрещенную и обратно соответствуют границам зон Бриллюэна. Иначе говоря, если энергия электрона E приближается к верхней или нижней границе разрешенной зоны, его импульс соответствует границе зоны Бриллюэна.

Действительно, согласно (29.22), переход от разрешенных к запрещенным значениям энергии E происходит, если постоянная Ляпунова удовлетворяет равенству: $L^2 = 1$. В разрешенной зоне L изменяется в пределах от -1 до $+1$ (или от $+1$ до -1), при этом постоянная ν в (29.23) принимает значения от $-\pi$ до $+\pi$ с точностью до $2\pi m$, где m — целое. Согласно (29.26) оба значения $\nu = \pm\pi$ соответствуют границам зон Бриллюэна $k = \pm\pi/a$ (или $\pi m/a$).

Таким образом показано, что волна Блоха с волновым числом $k = \pm\pi/a$ в кристалле распространяться не может, поскольку при этом энергия электрона соответствует одному из краев запрещенной зоны. Это утверждение можно обосновать и более наглядным способом.

Волны Блоха распространяются, интерферируют и дифрагируют по обычным законам волновой оптики. Пусть плоская волна длины λ падает нормально на систему расположенных на расстоянии a друг от друга кристаллических плоскостей (рис. 76). В случае одномерного кристалла каждая кристаллическая плоскость изображается точкой (один атом) и волна распространяется вдоль линии расположения атомов. Условие возникновения интерференционного максимума интенсивности в отраженной волне состоит в том, что разность хода $2a$ лучей, отраженных от соседних кристаллических плоскостей, равна целому числу длин волн:

$$2a = m\lambda, \quad (29.34)$$

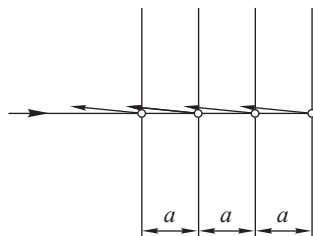


Рис. 76

где m — целое число. Выразив отсюда λ , найдем соответствующее волновое число k :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{m\pi}{a}. \quad (29.35)$$

Найденные значения k соответствуют границам зон Бриллюэна.

Условие (29.34) означает, что все отраженные от кристаллических плоскостей волны находятся в фазе и усиливают друг друга. При сильном отражении волна не может распространяться в кристалле, что характерно для запрещенной зоны. Каждая запрещенная зона соответствует некоторому диапазону изменения энергии и одному фиксированному значению волнового числа и импульса — границе какой-либо зоны Бриллюэна (см. (29.35)).

Закон дисперсии. Законом дисперсии частицы называется зависимость ее энергии E от импульса p : $E(p)$ (в трехмерном случае — $E(p_x), E(p_y), E(p_z)$). Закон дисперсии волны — зависимость частоты ω от волнового числа k : $\omega(k)$.

Закон дисперсии свободного электрона описывается функцией:

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (29.36)$$

где m — масса электрона (рис. 77).

Выбором постоянной Ляпунова (29.20), а с ней и волнового числа k (см. (29.23) и (29.26)) определяется (с точностью до постоянного множителя) волновая функция Блоха. Следовательно, определяется и энергия электрона E , которая входит в стационарное уравнение Шредингера (29.6) в качестве постоянного параметра. Таким образом, в пределах каждой разрешенной

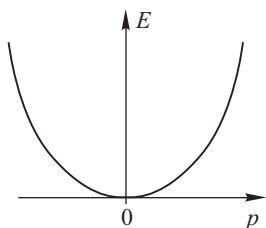


Рис. 77

зоны допустимые значения энергии электрона могут быть представлены как функции квазиимпульса $p = \hbar k$:

$$E = E(p). \quad (29.37)$$

Отсюда получаем

$$\omega = \omega(k), \quad (29.38)$$

поскольку $E = \hbar\omega$. Соотношения (29.37), (29.38) представляют собой законы дисперсии электрона и волны Блоха в кристалле. Законами дисперсии описывается взаимодействие электрона с ионами кристаллической решетки и остальными обобществленными электронами.

Функция $E(p)$ (29.37) имеет разрывы на границах зон Бриллюэна в пространстве импульсов (см. (29.35))

$$p = \hbar k = \frac{m\pi\hbar}{a},$$

где m — целое число. Каждое скачкообразное изменение функции $E(p)$ при переходе через границу зоны Бриллюэна соответствует запрещенной энергетической зоне.

Если взаимодействие электрона с полем решетки не очень сильное, закон дисперсии (29.37) мало отличается от такового для свободного электрона (29.36), а изменения затрагивают кривую зависимости $E(p)$ лишь вблизи границ зон Бриллюэна (рис. 78).

Два участка дисперсионной кривой $E(p)$, соответствующих второй зоне Бриллюэна, можно сместить в первую зону сдвигом навстречу друг другу вдоль оси абсцисс на $\Delta p = 2\pi\hbar/a$. Аналогично можно поступить с участками кривой во всех остальных зонах, сместив их в первую зону сдвигом вдоль оси абсцисс на величину, кратную $2\pi\hbar/a$. Тогда кривая зависимости энергии от импульса целиком располагается в первой зоне Бриллюэна, однако содержит несколько ветвей (рис. 79).

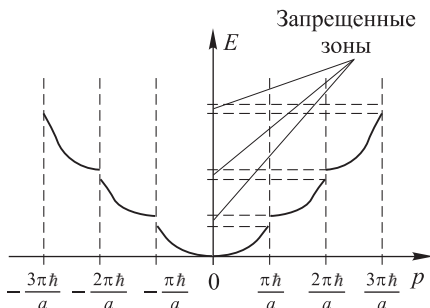


Рис. 78

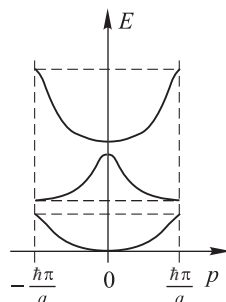


Рис. 79

Закон дисперсии электрона в кристалле определяется, как правило, экспериментально.

§ 30. Электропроводность кристаллов

Эффективная масса электрона в кристалле. Эффективная масса, обозначаемая символом m^* , — это величина, имеющая размерность массы и характеризующая динамические свойства электронов в кристалле. С ее помощью движение электрона под действием внешней силы \mathbf{F} может быть описано с помощью уравнения, формально совпадающего с уравнением второго закона Ньютона:

$$m^* \frac{dV}{dt} = F, \quad (30.1)$$

(в данном параграфе буква V используется для обозначения скорости электрона).

В этом выражении действие на электрон силы электрического поля кристалла учтено через эффективную массу m^* , и в явном виде эта сила в правую часть уравнения не входит. Эффективная масса m^* отличается от массы m свободного электрона. Это отличие отражает взаимодействие электрона с кристаллической решеткой и другими обобществленными электронами.

Пусть известен закон дисперсии электрона в кристалле $E(p)$. Если электрон локализован в некоторой ограниченной области кристалла, его волновая функция может быть представлена в виде суммы плоских волн Блоха вида (29.28), значения волновых чисел которых заключены в пределах некоторого интервала Δk . Если Δk невелико, суперпозиция плоских волн образует волновой пакет (см. кн. 4 «Колебания и волны. Оптика», § 44), а скорость движения электрона равна групповой скорости:

$$V = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}, \quad (30.2)$$

где ω и k — частота и волновое число волны Блоха, E и p — энергия и импульс электрона соответственно.

Эффективной массой m^ электрона в кристалле называется величина, определяемая равенством:*

$$\frac{1}{m^*} = \frac{d^2 E}{dp^2}. \quad (30.3)$$

В трехмерной решетке вместо $1/m^*$ необходимо рассматривать совокупность величин $\partial^2 E / \partial p_i \partial p_j$, где p_i , p_j — проекции импульса на координатные оси.

Причины, по которым определяемая формулой (30.3) величина m^* называется эффективной массой, следующие. Если электрон является свободным и его закон дисперсии описывается формулой (29.36), то m^* совпадает с обычной массой m . Действительно:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{d^2 E}{dp^2} = \frac{d^2 (p^2/2m)}{dp^2} = \frac{1}{m}.$$

Рассмотрим теперь электрон, который взаимодействует с полем кристалла. На рис. 80 показан график зависимости энергии E электрона от его импульса p в первой зоне Бриллюэна, соответствующий и одной из разрешенных зон.

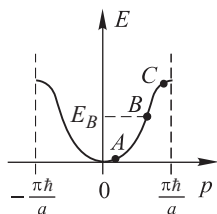


Рис. 80

Наложим на кристалл слабое постоянное электрическое поле. Закон дисперсии $E(p)$ при этом практически не изменится: все энергетические уровни внутри зоны несколько сместятся, но так как они расположены непрерывно, слегка сместятся границы разрешенной зоны, а изменение формы кривой $E(p)$ не произойдет. Однако наложенное электрическое поле вызовет изменения в заполнении энергетических уровней электронами. Электроны будут перераспределяться между квантовыми состояниями, в кристалле возникнет электрический ток.

Итак, на электрон в кристалле действует сила поля кристаллической решетки и внешняя сила $F = e\mathbf{E}$, где e — заряд электрона, \mathbf{E} — напряженность внешнего поля. Известен закон дисперсии электрона:

$$E = E(p). \quad (30.4)$$

Работа δA внешней силы F за время dt равна приращению энергии электрона dE и может быть выражена через мощность FV , где V — скорость электрона:

$$\delta A = dE = FV dt, \quad (30.5)$$

С учетом (30.4) и (30.2) представим dE в виде

$$dE = \frac{dE}{dp} dp = V dp. \quad (30.6)$$

Приравняв правые части (30.5) и (30.6), получим

$$\frac{dp}{dt} = F. \quad (30.7)$$

Последнее равенство совпадает по форме с записью второго закона Ньютона через импульс, однако отличается от него по существу: электрон испытывает действие сил поля кристалла и внешней силы F , а в правой части формулы (30.7) учитывается только сила F .

Дифференцирование соотношения (30.2) по времени дает:

$$\dot{V} = \frac{d^2 E}{dp^2} \frac{dp}{dt}. \quad (30.8)$$

Подставив в (30.8) dp/dt из (30.7) и $d^2 E/dp^2$ из (30.3), получим

$$m^* \dot{V} = F. \quad (30.9)$$

Согласно (30.9) электрон в кристалле движется как частица с массой, равной эффективной массе m^* , на которую действует только

внешняя сила F . Влияние поля кристалла учтено через эффективную массу, определяемую формулой (30.3).

Исследуем зависимость эффективной массы от «местоположения» электрона внутри разрешенной зоны (рис. 80). На нижней границе зоны энергия E минимальна, производная dE/dp , а с ней и скорость электрона (30.2), обращается в нуль. Поэтому вблизи нижней границы зоны разложение E по степеням p начинается с квадратичного члена:

$$E = \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{dp^2} p^2,$$

или с учетом (30.3):

$$E = \frac{p^2}{2m^*}. \quad (30.10)$$

Эффективная масса m^* в (30.10) положительна, так как функция $E(p)$ на рассматриваемом участке обращена выпуклостью вниз, и положительной является ее вторая производная. Если вблизи дна зоны (см. точку A на рис. 80) ход кривой $E(p)$ мало отличается от хода кривой для свободных электронов (ср. (30.10) и (29.36)), то эффективная масса приблизительно равна обычной массе электрона: $m^* \approx m$.

В точке перегиба (точка B на рис. 80) величина $d^2 E/dp^2$ равна нулю. Следовательно, m^* обращается в бесконечность. Это означает, что внешнее поле не может изменить скорость электрона, находящегося в состоянии с энергией E_B .

Вблизи верхней границы разрешенной зоны (у ее так называемого потолка: точка C на рис. 80) производная $d^2 E/dp^2 < 0$. В соответствии с этим эффективная масса электронов оказывается отрицательной. Это означает, что под совместным действием сил поля кристалла и внешнего поля $F = eE$ электрон получает ускорение, противоположное направлению внешней силы F . Электрон ведет себя как отрицательно заряженная частица с отрицательной массой m^* . Но в точности так же будет вести себя частица, у которой масса и заряд положительны. Такая частица называется *дыркой* (см. ниже, гл. X).

Участие в электропроводности кристалла электронов, энергия которых находится вблизи верхней границы разрешенной зоны, является существенным, когда электроны заполняют почти всю зону. В этом случае ток связан с наличием свободных состояний вблизи верхней границы. Так как число электронов, которые принимают участие в электрическом токе, в точности равно числу вакантных мест (дырок) в зоне, то носителями тока формально могут считаться дырки.

Электропроводность кристаллов. Везде ниже, рассматривая движение электрона в кристалле, под массой m будем подразумевать эффективную массу электрона, не помечая ее специально значком «звездочка».

Пусть E — напряженность внешнего электрического поля в кристалле (рис. 81). Обозначим через E модуль E во избежание путаницы

с энергией электрона E . Действующая на электрон со стороны внешнего поля сила равна $e\mathbf{E}$, где e — заряд электрона. Уравнение движения электрона (второй закон Ньютона) имеет вид

$$m\mathbf{a} = e\mathbf{E}.$$

Отсюда найдем ускорение

$$a = \frac{eE}{m}. \quad (30.11)$$

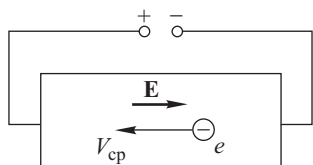


Рис. 81

Пусть τ — среднее время движения электрона между двумя последовательными столкновениями, называемое *средним временем свободного пробега*. Электрон испытывает столкновения с фононами, дефектами кристалла и примесями. В качестве оценки средней скорости упорядоченного движения электрона в кристалле, которая называется *скоростью дрейфа*, возьмем величину $a\tau$:

$$V_{\text{ср}} \approx a\tau = \frac{eE\tau}{m}. \quad (30.12)$$

Плотность тока j равна (см. кн. 3 § 18):

$$j = neV_{\text{ср}} = \frac{ne^2\tau}{m}E, \quad (30.13)$$

где n — концентрация электронов, участвующих в электропроводности кристалла.

Закон Ома в локальной форме связывает между собой плотность тока и напряженность электрического поля в проводнике:

$$j = \lambda E, \quad (30.14)$$

где λ — коэффициент пропорциональности, называемый *удельной электропроводностью* проводника.

Приравнявая правые части (30.13) и (30.14), найдем удельную электропроводность λ :

$$\lambda = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (30.15)$$

Отношение средней скорости электронов $V_{\text{ср}}$ к напряженности электрического поля E называется *подвижностью* и обозначается буквой u . Из (30.12) следует, что подвижность равна

$$u = \frac{V_{\text{ср}}}{E} = \frac{e\tau}{m}. \quad (30.16)$$

Удельную электропроводность металла (30.15) можно выразить через подвижность электронов u :

$$\lambda = neu. \quad (30.17)$$

С ростом температуры кристалла время свободного пробега τ уменьшается вследствие увеличения числа фононов. Концентрация n

электронов в зоне проводимости металлов остается приблизительно неизменной. В результате удельная электропроводимость λ металлического кристаллического проводника с ростом температуры уменьшается. Напротив, в так называемых полупроводниках (см. гл. X) число электронов, участвующих в электропроводности, с ростом температуры увеличивается, при этом удельная электропроводимость λ возрастает.

§ 31. Теплоемкость вырожденного электронного газа

Перейдем от изучения свойств отдельного электрона в кристалле к свойствам системы электронов, рассматривая их как газ частиц, каждая из которых подчиняется квантовым законам. Рассмотрим металлы — простые вещества, которые в твердом состоянии имеют кристаллическую структуру и обладают хорошей электро- и теплопроводностью. Металлы составляют значительную часть всех элементов периодической системы: свыше 80. В частности, элементы первой группы периодической системы — это щелочные металлы, второй группы — щелочноземельные металлы.

Характерные черты зонной структуры металлов таковы. Самая верхняя разрешенная зона, в которой имеются электроны, — это *валентная зона* (возникает из энергетических уровней валентных электронов атома). Электроны этой зоны являются обобщественными, число разрешенных квантовых состояний в валентной зоне превышает число имеющихся электронов. Таким образом, валентная зона является зоной проводимости.

Распределение электронов по энергиям. Энергия Ферми. Примем для оценки, что обобщественные электроны валентной зоны металла свободны, их энергия и импульс связаны между собой обычной формулой $E = p^2/2m$, где m — масса электрона. Электроны перемещаются по всему объему кристалла, отражаясь от его краев. Их движение напоминает обычное движение частиц в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. В этом случае волновые функции электронов по форме точно такие же, как волновые функции стационарных состояний фотонов в ящике с зеркальными стенками (см. (21.1)):

$$\psi_{\text{эл}}(x, y, z) = \psi_0 \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z),$$

где $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = 2mE/(\hbar^2)$, E — энергия электрона, m — его масса. Одинаковы и граничные условия, накладываемые на волновые функции электронов и фотонов на стенках ямы. Поэтому для электронного газа в кристалле можно пользоваться полученной выше (21.11) формулой статистического веса $g(E)$ — числа разрешенных квантовых состояний, отнесенного к единичному интервалу энергий:

$$g(E) = (2J + 1) \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{dE} = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{dE}. \quad (31.1)$$

Здесь $2J + 1 = 2s + 1 = 2$ — число проекций спина электрона, $d\Gamma$ — элементарный фазовый объем ($d\Gamma = 4\pi p^2 dV$, где p — импульс электрона), V — объем кристалла.

Электроны как частицы с полуцелым спином ($s = 1/2$) подчиняются статистике Ферми–Дирака. Среднее число частиц в квантовом состоянии с энергией E описывается формулой (см. (20.5)):

$$n_e = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(\kappa T)} + 1}, \quad (31.2)$$

где E_F — энергия Ферми (химический потенциал), κ — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Распределение Ферми–Дирака (31.2) графически изображено на рис. 82.

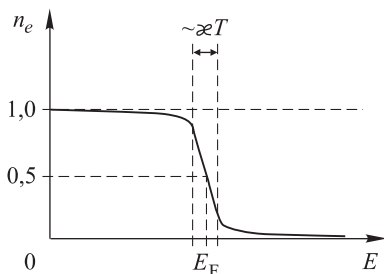


Рис. 82

Газ, свойства которого отличаются от свойств классического идеального газа вследствие взаимного квантовомеханического влияния частиц, называется *вырожденным*. В частности, эти отличия могут касаться распределения частиц по энергиям. Так, подчиняющийся статистике Ферми–Дирака (31.2) газ, вообще говоря, является вырожденным. Однако при высоких температурах это распределение переходит в обычное распределение частиц идеального газа, которое описывается множителем Больцмана $e^{E/(\kappa T)}$ (см. § 20), и в этом случае газ не вырожден.

Электронный газ называется *полностью вырожденным*, если все квантовые состояния с энергией, меньшей энергии Ферми, заняты, а все квантовые состояния с энергией, превышающей энергию Ферми, свободны. Электронный газ является полностью вырожденным, если его абсолютная температура T стремится к нулю. График функции распределения такого газа по форме похож на ступеньку (рис. 83).

При $T > 0$ ширина переходной области от полностью занятых уровней энергии ($n_e \approx 1$) к свободным ($n_e \ll 1$) составляет величину порядка κT (см. рис. 82). Электронный газ является *вырожденным*, если ширина переходной области много меньше энергии Ферми:

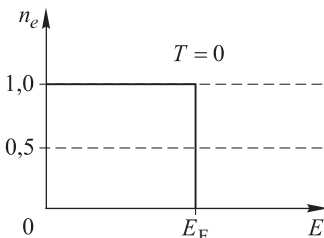


Рис. 83

$$\kappa T \ll E_F. \quad (31.3)$$

Таким образом, энергия Ферми E_F служит границей между заполненными и свободными уровнями энергии вырожденного электронного газа. Поскольку в металлах валентная зона заполнена электронами лишь частично, то энергия E_F находится внутри этой зоны.

Найдем энергию Ферми в металле. Пусть N — полное число электронов в валентной зоне кристалла. Его можно вычислить, интегрируя по значениям энергии E от нуля (нижняя граница зоны) до бесконечности произведение $n_e(E)g(E)dE$, равное числу частиц в квантовых состояниях с энергией в интервале от E до $E + dE$ (см. (20.6)):

$$N = \int_0^{\infty} n_e(E) g(E) dE, \quad (31.4)$$

здесь E_F входит в качестве параметра в выражение для n_e (см. (31.2)).

Предположим, что при обычных температурах условие (31.3) выполнено, и электронный газ вырожден. Ниже проверим это предположение и убедимся в его справедливости. Тогда функцию $n_e(E)$ (31.2) можно заменить приближенным выражением:

$$n_e \approx \begin{cases} 1 & \text{при } E < E_F \\ 0 & \text{при } E > E_F. \end{cases} \quad (31.5)$$

Подставим (31.5) в (31.4):

$$N = \int_0^{E_F} g(E) dE.$$

Теперь интегрирование ведется до верхнего предела E_F , а не до бесконечности, так как при $E > E_F$ $n_e = 0$ и подынтегральное выражение в (31.4) равно нулю. Воспользуемся формулой (31.1) для статистического веса и, выполнив интегрирование, получим

$$N = \int_0^{p_F} 2 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$N = \frac{p_F^3 V}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

где p_F — импульс электрона, связанный с энергией Ферми соотношением $E_F = p_F^2/2m$. Подставим $p_F = \sqrt{2mE_F}$:

$$N = \frac{(2mE_F)^{3/2} V}{3\pi^2 \hbar^3}.$$

Отсюда найдем энергию Ферми:

$$E_F = \frac{(3\pi^2 \hbar^3 n)^{2/3}}{2m}, \quad (31.6)$$

где введено обозначение $n = N/V$ — концентрация электронов в зоне проводимости (число электронов в единице объема кристалла).

Оценим E_F по формуле (31.6) при следующих значениях входящих в нее параметров: масса электрона $m \approx 10^{-30}$ кг, концентрация электронов в зоне проводимости для всех металлов по порядку величины равна $n \approx 5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ (один электрон на атом). Оценка дает:

$$E_F \approx 8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 5 \text{ эВ.}$$

При комнатной температуре ($T \approx 300 \text{ К}$) ширина переходной зоны в распределении (31.2) равна

$$\kappa T \approx 0,025 \text{ эВ,}$$

и следовательно

$$\kappa T \ll E_F,$$

то есть электронный газ вырожден. Это означает, что в зоне проводимости все нижние уровни энергии вплоть до E_F заполнены, все более высокие — свободны, а между ними находится узкая область шириной порядка κT , в которой имеются частично заполненные состояния.

Энергия теплового движения электронов становится сравнимой с энергией Ферми ($\kappa T \sim E_F$) при температуре около $5 \cdot 10^4 \text{ К}$, что во много раз превышает температуры, при которых существуют твердые тела. Таким образом, электронный газ в металлах вырожден при любых реально достижимых температурах.

Поверхностью Ферми называется изоэнергетическая поверхность в пространстве волновых чисел или импульсов, соответствующая энергии Ферми. Ее уравнение в указанных пространствах:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= E_F, \\ E(\mathbf{p}) &= E_F, \end{aligned} \quad (31.7)$$

где E — энергия электрона зоны проводимости, \mathbf{p} — его импульс, \mathbf{k} — волновой вектор ($\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$). Поверхность Ферми — это геометрическое место точек в пространстве импульсов или волновых чисел (по осям декартовой системы координат этих пространств отложены проекции импульса электрона p_x, p_y, p_z или волнового вектора k_x, k_y, k_z), которые соответствуют состояниям электрона со всеми возможными значениями импульса \mathbf{p} , но с одинаковой энергией E , равной энергии Ферми E_F . Поверхность Ферми имеет периодичность квазиимпульса и состоит из повторяющихся геометрических фигур.

Форма поверхности Ферми, как и любой изоэнергетической поверхности, зависит от закона дисперсии электрона $E(\mathbf{p})$. В случае свободных электронов закон дисперсии: $E = p^2/(2m)$, уравнение поверхности Ферми:

$$\frac{p^2}{2m} = E_F, \quad (31.8)$$

а сама поверхность представляет собой сферу с радиусом, равным

$$p_F = \sqrt{2mE_F}. \quad (31.9)$$

Для электронов в кристалле форма поверхности зависит от свойств решетки и может быть очень сложной. Существует некоторая аналогия между поверхностью Ферми и эквипотенциальными поверхностями в электростатике, которые также представляют собой поверхности постоянной энергии, но не в импульсном, а в обычном пространстве. Так, например, в электрическом поле точечного заряда эквипотенциальная поверхность сферическая, в поле бесконечно длинной равномерно заряженной нити — цилиндрическая.

Теплоемкость вырожденного электронного газа. В физике металлов важнейшую роль играют электроны, энергия которых близка к энергии Ферми (отличается от E_F на величину порядка $\hbar T$). Квантовые состояния таких электронов в пространстве импульсов (волновых чисел) изображаются точками, заполняющими узкую прилегающую к поверхности Ферми область. При различных физических процессах в металлах эти и только эти электроны изменяют свое квантовое состояние. На рис. 84 показано, что при нагревании кристалла от температуры T_1 до T_2 ширина переходной области энергий увеличивается от $\hbar T_1$ до $\hbar T_2$, форма кривой распределения (31.2) существенно изменяется лишь в пределах указанной области, что свидетельствует об изменении чисел заполнения соответствующих квантовых состояний.

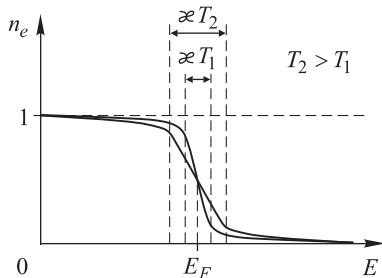


Рис. 84

Таким образом, подавляющая часть электронов кристалла никак не реагирует на его нагрев или охлаждение, их квантовое состояние и характер движения измениться не могут. Повышение температуры сказывается на той части электронов, энергия которых близка к энергии Ферми, только эти электроны участвуют в тепловом движении. Оценим их долю, обозначив ее через η .

Для оценки снова будем считать электроны в зоне проводимости металла почти свободными. Тогда поверхность Ферми сферическая с радиусом $p_F = \sqrt{2mE_F}$ (31.9). Заполненные квантовые состояния изображаются точками импульсного пространства, расположенными внутри ограниченного поверхностью Ферми объема, равного $4\pi p_F^3/3$. Полное число электронов проводимости пропорционально указанному объему.

Обозначим через Δp толщину прилегающего к поверхности Ферми слоя (рис. 85), соответствующего квантовым состояниям с энергией

от E_F до $E_F + \Delta E$, где $\Delta E \approx \kappa T$ — ширина переходной области. Учитывая, что $p = \sqrt{2mE}$, вычислим Δp :

$$\Delta p \approx \left(\frac{dp}{dE} \right)_{E=E_F} \cdot \Delta E \approx \sqrt{\frac{m}{2E_F}} \kappa T. \quad (31.10)$$

Доля η участвующих в тепловом движении электронов от полного числа электронов в зоне проводимости равна отношению объема рассматриваемого слоя $4\pi p_F^2 \Delta p$ к объему, ограниченному поверхностью Ферми:

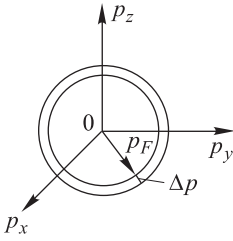


Рис. 85

$$\eta \approx \frac{4\pi p_F^2 \Delta p}{(4/3)\pi p_F^3} = \frac{3\Delta p}{p_F} \approx \frac{3\sqrt{m/(2E_F)} \kappa T}{\sqrt{2mE_F}} = \frac{3\kappa T}{2E_F}. \quad (31.11)$$

При $T \approx 300$ К величина η приблизительно равна: $\eta \approx 3 \times 0,025 \text{ эВ}/2 \cdot 5 \text{ эВ} = 0,0075$, то есть в тепловом движении участвуют менее 1% всех электронов.

Вычислим суммарную энергию теплового движения всех электронов, считая, что в соответствии с теоремой о равнораспределении на каждую степень свободы электрона приходится в среднем кинетическая энергия $\frac{1}{2}\kappa T$:

$$U_{\text{эл}} = 3n\eta \cdot \frac{1}{2}\kappa T = 3n \frac{3\kappa T}{2E_F} \cdot \frac{1}{2}\kappa T = \frac{9n\kappa^2 T^2}{4E_F}. \quad (31.12)$$

Здесь $U_{\text{эл}}$ — отнесенная к единице объема кристалла внутренняя энергия электронного газа, равная суммарной кинетической энергии электронов; n — концентрация электронов зоны проводимости, совпадающая в случае одновалентного металла с числом атомов в единице объема кристалла; η — доля участвующих в тепловом движении электронов (31.11); множитель 3 учитывает три поступательные степени свободы каждого электрона.

С учетом (31.12) теплоемкость единицы объема вырожденного электронного газа $C_{\text{эл}}$ равна:

$$C_{\text{эл}} = \frac{dU_{\text{эл}}}{dT} = \frac{9}{2}n\kappa \frac{\kappa T}{E_F}. \quad (31.13)$$

Здесь специально выделен множитель $\kappa T/E_F$, который, вследствие того что газ сильно вырожден, представляет собой малую величину:

$$\frac{\kappa T}{E_F} \ll 1. \quad (31.14)$$

Как следует из полученного выражения (31.13), теплоемкость вырожденного электронного газа пропорциональна его абсолютной температуре T . Этот результат обусловлен тем обстоятельством, что пропорционально температуре увеличивается доля η участвующих в тепловом движении электронов.

Вклад электронов в теплоемкость кристалла. Теплоемкость кристалла равна сумме решеточной и электронной теплоемкостей:

$$C_{\text{крист}} = C_{\text{реш}} + C_{\text{эл.}}$$

Рассмотрим два предельных случая — высоких и низких температур.

1. Пусть температура T кристалла много выше температуры Дебая θ_D :

$$T \gg \theta_D.$$

Из опыта известно, что в этих условиях теплоемкость кристалла в целом неплохо описывается законом Дюлонга и Пти (27.16):

$$C_{\text{крист}} = C_{\text{реш}} = 3n\kappa,$$

где n — число атомов в единице объема кристаллического образца. В этой формуле учтены только те степени свободы кристалла, которые связаны с движением атомов, и не принимаются во внимание электроны.

Сравним величины электронной $C_{\text{эл}}$ (31.13) и решеточной $C_{\text{реш}}$ (27.16) теплоемкостей с учетом (31.14):

$$C_{\text{эл}} = \frac{9}{2}n\kappa \frac{\kappa T}{E_F} \ll \frac{9}{2}n\kappa \approx 3n\kappa = C_{\text{реш}}. \quad (31.15)$$

Таким образом, при рассматриваемых высоких температурах электронная теплоемкость намного меньше решеточной и практически не вносит вклад в теплоемкость кристалла в целом.

2. Рассмотрим случай низких температур:

$$T \ll \theta_D.$$

В этих условиях, согласно (27.12), теплоемкость фононного газа (решетки) пропорциональна кубу температуры:

$$C_{\text{реш}} = \frac{2\pi^2}{5} \frac{\kappa^4 T^3}{\hbar^3 s^3},$$

а теплоемкость электронного газа — ее первой степени (см. (31.13)):

$$C_{\text{эл}} = \frac{dU_{\text{эл}}}{dT} = \frac{9}{2}n\kappa \frac{\kappa T}{E_F}.$$

При температуре порядка 1 К электронная теплоемкость превышает решеточную:

$$C_{\text{эл}} \gg C_{\text{реш}}.$$

В этих условиях теплоемкость кристалла в целом определяется теплоемкостью электронного газа:

$$C_{\text{крист}} \approx C_{\text{эл}}.$$

Задачи

9.1. Вычислить при температуре $T = 0$ К энергию Ферми, соответствующие этой энергии импульс и скорость электронов в металле с изотропным квадратичным законом дисперсии $E = p^2/2m^*$. Эффективная масса m^* равна 0,8 массы свободного электрона. Концентрация электронов 10^{29} м^{-3} .

9.2. Найти при температуре $T = 0$ К для электронов с квадратичным законом дисперсии $E = p^2/2m^*$ связь между средней энергией $E_{\text{ср}}$ и энергией Ферми $E_{\text{Ф}}$.

9.3. Оценить отношение средней потенциальной энергии взаимодействия двух электронов U к энергии Ферми $E_{\text{Ф}}$ для металла, электроны которого наполовину заполняют зону проводимости (одновалентный металл). Концентрация атомов $n = 3 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, эффективную массу электронов считать равной массе свободного электрона.

9.4. Удельное сопротивление сплава Ag+1% Ni при температуре $T \approx 0$ К равно $\rho = 10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{см}$. Постоянная решетки $a = 3 \text{ \AA}$, решетку считать кубической, в зону проводимости каждый атом серебра отдает один электрон. Оценить величину сечения рассеяния σ электронов на атомах никеля.

9.5. Оценить решеточный и электронный вклады в теплоемкость серебра при температурах 300 и 3 К. Температура Дебая равна $\theta_{\text{Д}} = 220$ К. Концентрация электронов равна $n = 5,9 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$.

9.6. Для одновалентного металла, описываемого моделью свободных электронов, энергия Ферми равна $E_{\text{Ф}} = 7$ эВ, а отношение эффективной массы к массе свободного электрона $m^*/m_e = 1,5$. Найти электронный вклад в теплоемкость кристалла при 1 К.

ПОЛУПРОВОДНИКИ

§ 32. Чистые и примесные полупроводники. Концентрация электронов и дырок

Полупроводниками называются кристаллические вещества, которые при низких температурах являются изоляторами, а при нормальных температурах, с которыми имеют дело в повседневной жизни, — проводят электрический ток.

В полупроводниках число электронов в *валентной зоне* (так называется самая верхняя из заполненных разрешенная зона кристалла, которая образуется из энергетических уровней валентных электронов атомов) при стремлении температуры к абсолютному нулю равно числу квантовых состояний этой зоны. Поскольку все состояния заполнены, зона не является зоной проводимости.

Над верхней границей валентной зоны на расстоянии порядка 1 эВ находится нижняя граница соседней разрешенной зоны, которая называется *зоной проводимости*. Указанное расстояние (ширину запрещенной зоны) называют *шириной щели* полупроводника. При абсолютном нуле зона проводимости не содержит электронов. При нормальных температурах часть электронов валентной зоны за счет энергии теплового движения переходит в зону проводимости. В результате обе зоны — валентная и проводимости — оказываются заполненными частично, в обеих появляется электропроводность.

Зонная структура изоляторов похожа на структуру полупроводников: валентная зона заполнена, соседняя вышележащая разрешенная зона пуста, а ширина запрещенной зоны между ними составляет более 3 эВ. В этом случае при любых температурах энергии теплового движения недостаточно для перехода электрона валентной зоны в вышележащую разрешенную зону. Таким образом, частично заполненная зона отсутствует. Изоляторы — это кристаллы, которые не проводят электрический ток. Исключение составляют случаи так называемого пробы, который наступает в сильных электрических полях.

Полупроводники делятся на два класса — *чистые* или *собственные* и *примесные*. К числу собственных относятся химически чистые полупроводники, типичные представители которых — это элементы IV группы периодической системы Менделеева германий (Ge) и кремний (Si). Примесные полупроводники получают из чистых путем искусственного введения примесей, в частности, элементов пятой группы периодической системы — фосфора (P), мышьяка (As), сурьмы (Sb),

или элементов третьей группы — бора (B), алюминия (Al), галлия (Ga) индия (In).

Носителями тока в собственных полупроводниках служат электроны в зоне проводимости и *дырки* в валентной зоне. Доля носителей составляет приблизительно 10^{-10} от числа атомов кристалла (напомним, что в металлах число электронов проводимости примерно равно числу атомов). Даже небольшие концентрации примесей способны существенно изменить число носителей в полупроводниках и повлиять на их электрические свойства.

В примесных полупроводниках *n-типа* (от слова negative — отрицательный) основной тип носителей тока — электроны в зоне проводимости. Это свободные электроны, источником которых являются примесные атомы с валентностью, на единицу большей валентности основных атомов. Примесь называется *донорной*.

В примесных полупроводниках *p-типа* (от слова positive — положительный) основной тип носителей тока — дырки в валентной зоне. Они образуются благодаря тому, что атомы примеси с валентностью, на единицу меньшей валентности основных атомов, забирают (акцептируют) электроны из валентной зоны. Такая примесь называется *акцепторной*.

Если удалить электрон из валентной зоны, через некоторое время освободившееся квантовое состояние (вакансия) будет занято другим электроном этой зоны. В результате появится другое незаполненное состояние, которое вскоре также будет занято валентным электроном с одновременным освобождением следующего состояния, и т. д. Этот процесс многократно повторяется. Незаполненное состояние как бы блуждает по кристаллу, однако происходит это в результате движения электронов. При наличии незаполненных состояний описанное поведение электронов валентной зоны может рассматриваться как движение положительно заряженных частиц, называемых дырками. Таким образом, появление дырки ассоциируется с незаполненным квантовым состоянием электрона.

К понятию дырки можно прийти и другим путем (см. выше, § 30). В результате перехода электронов в зону проводимости незаполненные состояния (уровни) образуются у потолка валентной зоны. Эффективная масса электрона с энергией, близкой к верхней границе разрешенной зоны, отрицательна. Удаление из валентной зоны электрона с отрицательным зарядом e и отрицательной массой m^* эквивалентно возникновению частицы с положительным зарядом $|e|$ и положительной массой $|m^*|$. Эта частица — дырка.

По своим электрическим свойствам валентная зона с небольшим числом свободных вакансий эквивалентна пустой зоне, содержащей небольшое число положительно заряженных частиц — дырок. Движение дырки не есть перемещение какой-то реальной положительно заряженной частицы. Представление о дырках отображает характер движения всей многоэлектронной системы в полупроводнике.

Рассмотрим несколько примеров.

Химическое строение чистых полупроводников. Кристалл германия (Ge) является чистым полупроводником. Электронная конфигурация атома следующая: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$; валентность равна четырем, химическая связь между атомами в кристалле ковалентная. Каждый атом связан с четырьмя равноотстоящими от него соседними атомами, кристаллическая решетка октаэдрическая, типа алмаза. Условное изображение кристалла германия представлено на рис. 86.

Подобно германию устроен кристалл кремния (Si), который является чистым полупроводником. Электронная конфигурация атома:

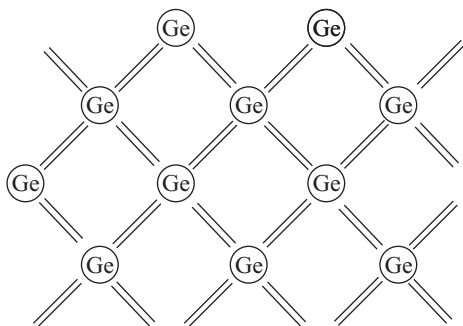


Рис. 86

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$; валентность равна четырем, химическая связь в кристалле ковалентная. Кристаллическая решетка октаэдрическая.

К чистым полупроводникам относятся некоторые бинарные соединения, например, GaAs, AlSb, InSb и другие.

Химическое строение примесных полупроводников. Кристалл четырехвалентного германия с примесью пятивалентного фосфора является примесным полупроводником *n*-типа (рис. 87). Для образования ковалентных связей с соседями атому фосфора достаточно четырех электронов. Пятый валентный электрон оказывается лишним, легко отщепляется от атома фосфора, образуя свободный электрон (по своей энергии он находится в зоне проводимости). В отличие от чистых полупроводников, образование свободного электрона не сопровождается нарушением ковалентных связей, то есть образованием дырки. Хотя в окрестности атома фосфора возникает избыточный положитель-

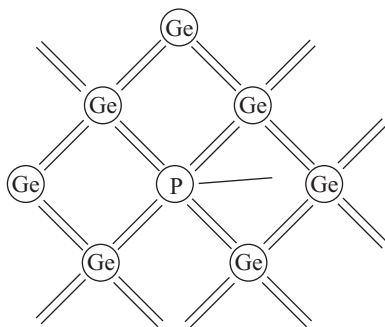


Рис. 87

ный заряд, он связан с этим атомом и перемещаться по решетке не может. Таким образом, в полупроводнике с примесью, валентность которой на единицу больше валентности основных атомов, имеется только один вид носителей тока — электроны.

Примером примесного полупроводника p -типа является кристалл четырехвалентного германия с добавкой трехвалентного элемента —

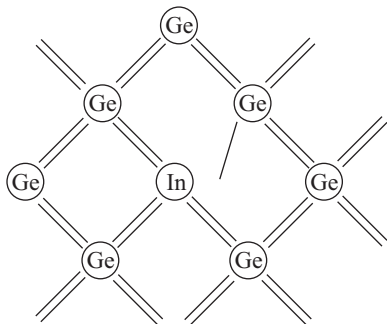


Рис. 88

индия (рис. 88). Трех валентных электронов атома индия недостаточно для образования связей со всеми четырьмя соседями — атомами германия. Одна из связей соседнего с индием германия оказывается неупакованной и представляет собой место, способное захватить электрон. При переходе на это место электрона одной из полноценных ковалентных связей атомов германия возникает дырка, которая будет кочевать по кристаллу. Вблизи атома примеси возникает избыточный отрицательный заряд, кото-

рый связан с данным атомом и не может служить носителем тока. Таким образом, в полупроводнике с примесью, валентность которой на единицу меньше валентности основных атомов, возникают носители тока одного вида — дырки.

Зонная структура полупроводников. На рис. 89 показана зонная структура чистого полупроводника при абсолютном нуле (рис. 89а) и при нормальной температуре (рис. 89б). При 0 К все уровни валентной зоны заполнены, в зоне проводимости электроны отсутствуют, и полупроводник ведет себя как диэлектрик. При отличных от 0 К температурах за счет энергии теплового движения часть электронов с верхних уровней валентной зоны переходит на нижние уровни зоны проводимости. В результате электропроводность полупроводника становится отличной от нуля.

Примеси искажают электрическое поле кристалла, что приводит к возникновению на энергетической схеме примесных уровней, расположенных в запрещенной зоне. В случае полупроводников n -типа примесные уровни называются *донорными*, а в случае полупроводников p -типа — *акцепторными*.

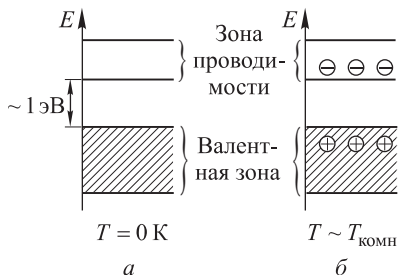


Рис. 89

В полупроводниках n -типа донорные уровни располагаются на расстоянии порядка $0,01$ эВ от дна зоны проводимости (рис. 90). Энергия теплового движения при нормальных температурах оказывается достаточной для того, чтобы перевести электрон с донорного уровня в зону проводимости. Этому соответствует отщепление пятого валентного электрона от атома примеси и превращение его в свободный электрон. Число электронов в зоне проводимости намного превышает число дырок в валентной зоне. Основными носителями электрического тока в полупроводниках n -типа являются электроны зоны проводимости.

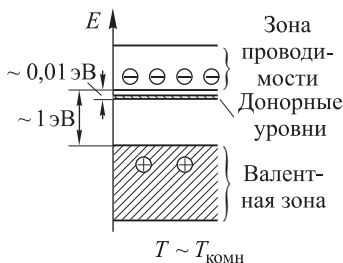


Рис. 90



Рис. 91

В полупроводниках p -типа акцепторные уровни располагаются на расстоянии порядка $0,01$ эВ от потолка валентной зоны (рис. 91). Электроны валентной зоны легко переходят на акцепторные энергетические уровни. Этому соответствует образование дырок в валентной зоне. Число дырок в валентной зоне намного превышает число электронов в зоне проводимости. Основными носителями электрического тока в полупроводниках p -типа являются дырки в валентной зоне.

Концентрация электронов и дырок. Остановимся на вычислении концентрации электронов в зоне проводимости, учитывая, что расчет концентрации дырок в валентной зоне выполняется точно также, но с заменой параметров электронов на параметры дырок.

Концентрации электронов и дырок в соответствующих зонах полупроводника любого типа невелики, так что нет необходимости учитывать квантовомеханические взаимодействия этих частиц друг с другом. Электроны в зоне проводимости можно рассматривать как идеальный газ частиц с законом дисперсии:

$$E' = \frac{p^2}{2m_n^*}, \quad (32.1)$$

где E' — энергия электрона, отсчитываемая от нижней границы (дна) зоны проводимости, p — импульс электрона, m_n^* — его эффективная масса. Распределение частиц по энергиям в зоне проводимости является классическим и описывается множителем Больцмана (см. ниже).

В результате многие задачи можно решать с помощью обычных формул кинетической теории газов.

Учитывая, что почти все состояния валентной зоны заполнены, а зоны проводимости — свободны, можно полагать, что уровень Ферми системы обобществленных электронов кристалла (совокупности всех



Рис. 92

валентных электронов атомов) располагается между этими зонами, то есть в запрещенной зоне (рис. 92). Обозначим расстояние между уровнем Ферми и дном зоны проводимости через ξ , между уровнем Ферми и верхней границей (потолком) валентной зоны — через η ; тогда ширина запрещенной зоны $\Delta = \xi + \eta$; E_F — энергия Ферми обобществленных электронов кристалла (отсчитывается от дна валентной зоны).

В соответствии с распределением Ферми–Дирака среднее число электронов n_e в квантовом состоянии с энергией E вычисляется по формуле:

$$n_e = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(\kappa T)} + 1}. \quad (32.2)$$

Значение E отсчитывается от дна валентной зоны и принадлежит зоне проводимости. Разность $E - E_F = E' + \xi \geq \xi$ по порядку величины равна ширине запрещенной зоны Δ ($\Delta \approx 1$ эВ) и намного превышает величину κT (при нормальных комнатных температурах $\kappa T \approx 0,025$ эВ):

$$E - E_F \gg \kappa T.$$

В распределении (32.2) можно пренебречь единицей по сравнению с экспонентой, после чего оно переходит в распределение Больцмана:

$$n_e = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(\kappa T)} + 1} \approx e^{-\frac{E-E_F}{\kappa T}} = e^{-\frac{E'+\xi}{\kappa T}}. \quad (32.3)$$

Число квантовых состояний в зоне проводимости с энергий в интервале от E' до $E' + dE'$ равно (см. (31.1)):

$$g(E')dE' = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} V, \quad (32.4)$$

где V — объем кристалла, а импульс p связан с E' соотношением (32.1).

Для вычисления полного числа электронов в зоне проводимости N_n нужно умножить число электронов в одном квантовом состоянии с энергией E' (32.3) на число квантовых состояний в интервале от E' до $E' + dE'$ (31.4) и проинтегрировать полученное выражение по E' от нижней ($E' = 0$) до верхней границы зоны проводимости, причем верхний предел можно положить равным бесконечности благодаря

быстрому уменьшению экспоненты (32.3) с ростом E' . Вычисление приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned}
 N_n &= \int_0^{\infty} n_e(E) g(E') dE' = \\
 &= \int_0^{\infty} e^{-\frac{E'+\xi}{\kappa T}} \cdot 2 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi \hbar)^3} = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} e^{-\frac{\xi}{\kappa T}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{E'}{\kappa T}} \cdot 2m_n^* E' d(\sqrt{2m_n^* E'}) = \\
 &= \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} (2m_n^* \kappa T)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\xi}{\kappa T}} \int_0^{\infty} e^{-\left(\sqrt{\frac{E'}{\kappa T}}\right)^2} \left(\sqrt{\frac{E'}{\kappa T}}\right)^2 d\left(\sqrt{\frac{E'}{\kappa T}}\right) = \\
 &= \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} (2m_n^* \kappa T)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\xi}{\kappa T}} \int_0^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} (2m_n^* \kappa T)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\xi}{\kappa T}} \frac{\sqrt{\pi}}{4} = \\
 &= V \frac{2}{\hbar^3} \left(\frac{m_n^* \kappa T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\xi}{\kappa T}}.
 \end{aligned}$$

Концентрация электронов в зоне проводимости полупроводника, обозначаемая через n_n , равна полученному выражению, деленному на объем кристалла V :

$$n_n = Q_n e^{-\frac{\xi}{\kappa T}}, \quad (32.5)$$

где

$$Q_n = \frac{2}{\hbar^3} \left(\frac{m_n^* \kappa T}{2\pi}\right)^{3/2}. \quad (32.6)$$

Аналогично вычисляется концентрация дырок n_p в валентной зоне:

$$n_p = Q_p e^{-\frac{\eta}{\kappa T}}, \quad (32.7)$$

где

$$Q_p = \frac{2}{\hbar^3} \left(\frac{m_p^* \kappa T}{2\pi}\right)^{3/2}, \quad (32.8)$$

m_p^* — эффективная масса дырки.

В выражениях Q_n и Q_p входят эффективные массы электронов и дырок. Из опыта известно, что у германия и кремния их значения зависят от направления движения частиц относительно осей кристалла. У германия наибольшая («продольная») и наименьшая («поперечная») эффективные массы электрона m_n^* равны соответственно: $1,6m$ и $0,08m$, где m — обычная масса электрона. Соответствующие тем же направлениям в кристалле массы дырок m_p^* составляют $0,34m$ и $0,04m$.

Отметим, что формулы (32.5)–(32.8) одинаково применимы как к собственным, так и к примесным полупроводникам.

Положение уровня Ферми. В чистых полупроводниках дырка в валентной зоне образуется при переходе электрона из валентной зоны

в зону проводимости. При встрече свободного электрона с дыркой они соединяются (рекомбинируют), что приводит к одновременному исчезновению свободного электрона и дырки. Таким образом, у собственных полупроводников концентрации электронов и дырок равны друг другу:

$$n_n = n_p.$$

Приравнявая правые части (32.5) и (32.7)

$$Q_n e^{-\frac{\xi}{\kappa T}} = Q_p e^{-\frac{\eta}{\kappa T}},$$

после подстановки (32.6) и (32.8) и соответствующих преобразований получим

$$\xi - \eta = \frac{3}{2} \kappa T \ln \frac{m_p^*}{m_n^*}.$$

Поскольку эффективные массы электрона и дырки отличаются не более, чем в 2–3 раза, и следовательно множитель $\ln(m_p^*/m_n^*)$ по модулю не превышает единицы, имеем

$$\xi - \eta \sim \kappa T.$$

Величина κT мала по сравнению с шириной запрещенной зоны Δ : $\kappa T \ll \Delta$. Поэтому с хорошей точностью (порядка κT) можно считать:

$$\xi = \eta. \quad (32.9)$$

Последнее равенство означает, что *уровень Ферми в чистых полупроводниках расположен посередине запрещенной зоны* (рис. 93).

Рассмотрим примесные полупроводники n -типа. В них концентрация электронов проводимости n_n значительно превышает концентрацию дырок n_p :

$$n_n \gg n_p,$$

$$Q_n e^{-\frac{\xi}{\kappa T}} \gg Q_p e^{-\frac{\eta}{\kappa T}}.$$

Вновь используя приближенное равенство $m_n^* \approx m_p^*$ и, следовательно, $Q_n \approx Q_p$, получим

$$\xi \ll \eta. \quad (32.10)$$

Неравенство (32.10) означает, что *в примесных полупроводниках n -типа уровень Ферми расположен вблизи дна зоны проводимости* (рис. 94).

В примесных полупроводниках p -типа концентрация дырок n_p значительно превышает концентрацию электронов n_n :

$$n_p \gg n_n,$$

$$Q_p e^{-\frac{\eta}{\kappa T}} \gg Q_n e^{-\frac{\xi}{\kappa T}}.$$

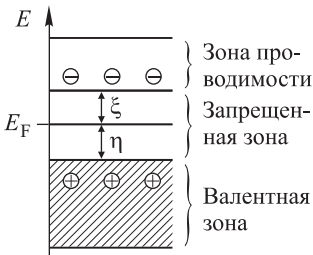


Рис. 93

Считая, что $Q_n \approx Q_p$, получим:

$$\xi \gg \eta. \quad (32.11)$$

Неравенство (32.11) показывает, что *уровень Ферми в примесных полупроводниках р-типа расположен вблизи потолка валентной зоны* (рис. 95).

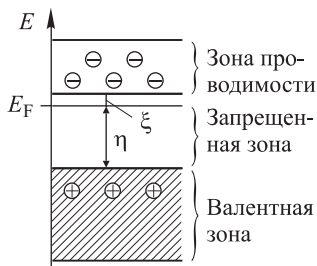


Рис. 94

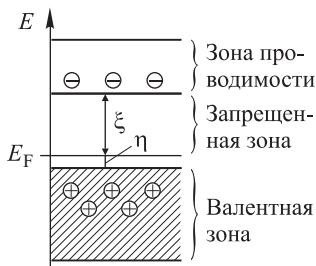


Рис. 95

Таким образом, введение в собственный полупроводник донорной примеси приводит к смещению уровня Ферми от середины запрещенной зоны вверх, к зоне проводимости, а добавление акцепторной примеси — вниз, к валентной зоне.

§ 33. Электропроводность полупроводников

Соотношение концентраций электронов и дырок. Обозначим через n_i равные друг другу концентрации электронов в зоне проводимости n_n и дырок в валентной зоне n_p собственного полупроводника:

$$n_n = n_p = n_i.$$

Используя (32.5) и (32.7), вычислим произведение $n_n n_p$:

$$n_n n_p = n_i^2 = Q_n Q_p e^{-\frac{\xi + \eta}{kT}} = Q_n Q_p e^{-\frac{\Delta}{kT}}. \quad (33.1)$$

где $\Delta = \xi + \eta$ — ширина запрещенной зоны.

С помощью (33.1) концентрацию электронов и дырок в собственном полупроводнике можно представить в виде

$$n_n = n_p = n_i = \sqrt{Q_n Q_p} e^{-\frac{\Delta}{2kT}}. \quad (33.2)$$

Равенство (33.2) показывает, что в собственных полупроводниках концентрации носителей тока зависят от свойств кристалла, а именно: от эффективных масс электрона и дырки m_n^* и m_p^* , которые входят в коэффициенты Q_n и Q_p , а также от ширины запрещенной зоны Δ . С ростом температуры концентрации носителей экспоненциально увеличивается.

Рассмотрим какой-либо примесный полупроводник n - или p -типа. Обозначим концентрацию электронов в зоне проводимости через $n_{n \text{ прим}}$, концентрацию дырок в валентной зоне того же полупроводника через $n_{p \text{ прим}}$. Согласно (32.5), (32.7)

$$n_{n \text{ прим}} = Q_n e^{-\frac{\xi}{\kappa T}}, \quad (33.3)$$

$$n_{p \text{ прим}} = Q_p e^{-\frac{\eta}{\kappa T}}. \quad (33.4)$$

Вычислим произведение концентраций носителей:

$$n_{n \text{ прим}} n_{p \text{ прим}} = Q_n Q_p e^{-\frac{\xi + \eta}{\kappa T}} = Q_n Q_p e^{-\frac{\Delta}{\kappa T}}. \quad (33.5)$$

Формула (33.5) показывает, что произведение $n_{n \text{ прим}} n_{p \text{ прим}}$ не зависит от параметров ξ и η в отдельности, а определяется их суммой Δ , равной ширине запрещенной зоны. Следовательно, произведение концентраций электронов и дырок в полупроводнике не зависит от положения уровня Ферми, то есть от количества примесей и, вообще, от их наличия. При введении в чистый полупроводник донорных атомов концентрация электронов проводимости увеличивается, а концентрация дырок уменьшается. Наоборот, при введении акцепторных атомов концентрация дырок увеличивается за счет уменьшения концентрации электронов.

Формулу (33.5) с учетом (33.2) можно представить в следующем виде:

$$n_{n \text{ прим}} n_{p \text{ прим}} = n_i^2. \quad (33.6)$$

Таким образом, *произведение концентраций электронов и дырок в полупроводнике не зависит от количества примесей и равно квадрату концентрации носителей тока в чистом полупроводнике.*

Электропроводность полупроводников. В собственных полупроводниках электроны и дырки вносят одинаковый вклад в электропроводность, механизм электропроводности таких полупроводников электронно-дырочный. В полупроводниках n -типа *основными носителями* тока являются электроны, *неосновными* — дырки (электронный механизм электропроводности). В полупроводниках p -типа *основными носителями* тока являются дырки, *неосновными* — электроны (дырочный механизм электропроводности).

Применим формулу удельной электропроводимости кристалла (30.15) к полупроводникам, учитывая, что имеется два типа носителей тока — электроны и дырки. Соответственно удельная электропроводность полупроводника λ равна:

$$\lambda = \frac{n_n e^2 \tau_n}{m_n^*} + \frac{n_p e^2 \tau_p}{m_p^*} = n_n e u_n + n_p e u_p, \quad (33.7)$$

где n_n и n_p — концентрации носителей, τ_n и τ_p — время свободного пробега, m_n^* и m_p^* — эффективные массы, u_n и u_p — подвижности

электронов и дырок соответственно. Формула (33.7) применима к любому полупроводнику, как собственному, так и примесному.

Исследуем зависимость λ от концентрации носителей. Принимая во внимание, что реальные характеристики электронов и дырок могут отличаться не более, чем в несколько раз, для оценок будем полагать

$$\tau_n \approx \tau_p, \quad m_n^* \approx m_p^*, \quad u_n \approx u_p, \quad (33.8)$$

Воспользуемся формулой (33.6), представив ее в виде

$$n_n n_p = n_i^2, \quad (33.9)$$

где n_i — концентрация носителей в чистом полупроводнике, а через n_n и n_p обозначены концентрации носителей в полупроводнике любого типа — чистого или примесного. Выразим из (33.9) n_p через n_n :

$$n_p = \frac{n_i^2}{n_n}. \quad (33.10)$$

Из (33.7) с учетом (33.8) и (33.10) получим

$$\lambda = \frac{e^2 \tau_n}{m_n^*} \left(n_n + \frac{n_i^2}{n_n} \right). \quad (33.11)$$

График зависимости λ от концентрации электронов n_n показан на рис. 96. Как следует из (33.11), наименьшее значение удельной электропроводности λ_{\min} достигается при $n_n = n_i$, что соответствует чистому или почти чистому (с учетом приближенного характера равенств (33.8)) полупроводнику. Введение любой примеси, донорной или акцепторной, сопровождается изменением концентрации электронов n_n и приводит к увеличению электропроводности. Таким образом, *наименьшей удельной электропроводностью обладают чистые полупроводники.*

Рассмотрим зависимость электропроводности от температуры у собственных полупроводников. При изменении температуры удельная электропроводность λ (33.7) меняется в результате изменения концентрации носителей и их времени свободного пробега. С ростом температуры увеличивается число фононов, на которых рассеиваются электроны, в результате чего время свободного пробега уменьшается. Влияние на удельную электропроводность этого фактора перекрывается быстрым увеличением концентрации носителей, которая экспоненциально возрастает с увеличением температуры (см. (33.2)).

В примесных полупроводниках эффект уменьшения времени свободного пробега электронов с ростом температуры, как и в чистых полупроводниках, перекрывается увеличением концентрации носителей.

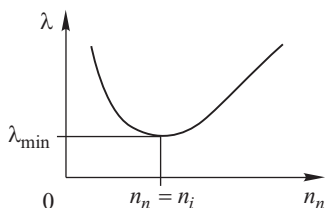


Рис. 96

Однако второй процесс является более сложным: он включает изменение концентрации примесных и собственных носителей тока. При повышении температуры концентрация примесных носителей быстро достигает насыщения и перестает меняться. Это означает, что освобождаются практически все донорные или заполняются электронами практически все акцепторные уровни. Описанный процесс в большинстве примесных полупроводников заканчивается при температурах несколько десятков кельвинов, то есть задолго до комнатных температур. После того как опустошение донорных и заполнение акцепторных уровней заканчивается, дальнейшее увеличение температуры приводит к росту собственной проводимости, который обусловлен переходом электронов непосредственно из валентной зоны в зону проводимости. Этот процесс в примесных полупроводниках происходит также как в чистых и описывается формулой (33.2). Таким образом, в примесных полупроводниках при низких температурах преобладает примесная, а при высоких — собственная проводимость.

§ 34. n - p -переход

n - p -переходом называется область контакта двух примесных полупроводников, один из которых относится к n -типу, другой — к p -типу. Для изготовления такого перехода берут, например, кристалл германия с небольшим количеством донорных примесей, который является полупроводником n -типа с электронным механизмом электропроводности, и вплавляют в него кусочек индия. В той области германия, в которую в результате диффузии проникают атомы индия, электропроводность германия становится дырочной, эта область является полупроводником p -типа. На границе указанной области и возникает n - p -переход.

В результате утечки электронов из полупроводника n -типа в полупроводник p -типа и утечки дырок в обратном направлении в области контакта образуется *двойной электрический слой* и возникает

контактная разность потенциалов.

На рис. 97 двойной электрический слой условно изображен в виде системы разделенных в пространстве положительных и отрицательных зарядов. Толщина этого пограничного слоя, обозначенная через l , — порядка 10^{-5} см. Электрическое поле, вектор напряженности которого направлен от полупроводника n -типа к полупроводнику p -типа, препятствует утечке основных носителей тока.

После установления контактной разности потенциалов ток в полупроводнике прекращается, наступает состояние динамического равновесия: число электронов, пересекающих слой в обоих направлениях, одинаково, это же относится и к дыркам.

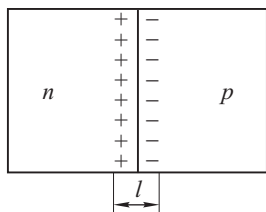


Рис. 97

Положение уровня Ферми. Докажем утверждение, согласно которому в состоянии равновесия энергия Ферми по обе стороны *n-p*-перехода одинакова.

Относительное положение уровня Ферми E_F в изолированных друг от друга полупроводниках, изготовленных из одного и того же материала и отличающихся только типом примеси, показано на рис. 98. Ис-

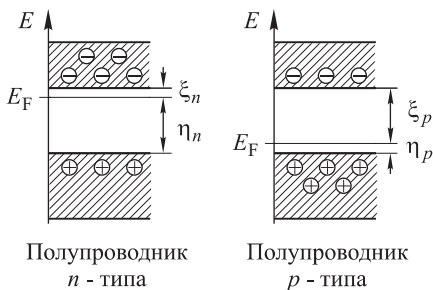


Рис. 98

пользованы следующие обозначения: E — энергия электрона; ξ_n , ξ_p — расстояние от уровня Ферми до нижней границы зоны проводимости; η_n , η_p — расстояние от уровня Ферми до верхней границы валентной зоны в полупроводниках *n*-и *p*-типа соответственно.

Введем обозначения: $n_{n,n}$ — концентрация электронов проводимости в полупроводнике *n*-типа (основных носителей тока); $n_{n,p}$ — концентрация электронов проводимости в полупроводнике *p*-типа (неосновных носителей тока); Δ_k — высота потенциального барьера в области *n-p*-перехода на пути электрона из полупроводника *n*-типа в полупроводник *p*-типа.

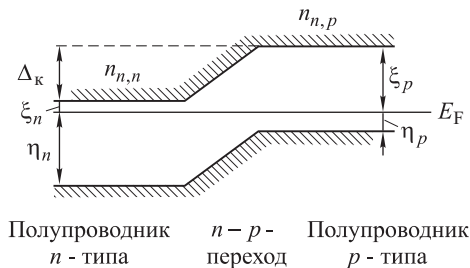


Рис. 99

На рис. 99 изображена зонная структура полупроводников в области *n-p*-перехода. В соответствии с формулой (32.5) концентрация электронов слева от *n-p*-перехода равна:

$$n_{n,n} = Q_n e^{-\frac{\xi_n}{kT}}. \quad (34.1)$$

Концентрация электронов справа от n - p -перехода равна:

$$n_{n,p} = Q_n e^{-\frac{\xi_p}{\kappa T}}. \quad (34.2)$$

Электроны в зоне проводимости любого полупроводника можно рассматривать как идеальный газ частиц с максвелловским распределением по скоростям. Пусть $V_{\text{ср}}$ — средняя тепловая скорость частиц. Плотность потока электронов из n - в p -полупроводник равна

$$j_{n,n} = \frac{1}{4} n_{n,n} V_{\text{ср}} e^{-\frac{\Delta_{\kappa}}{\kappa T}}, \quad (34.3)$$

где множитель $1/4 n_{n,n} V_{\text{ср}}$ — число столкновений частиц газа за единицу времени с единичной площадкой, $e^{-\frac{\Delta_{\kappa}}{\kappa T}}$ — множитель Больцмана, позволяющий вычислить долю частиц, способных преодолеть потенциальный барьер высотой Δ_{κ} .

Поскольку электрическое поле в области n - p -перехода способствует прохождению через переход неосновных носителей тока, все подошедшие из p -полупроводника к пограничному слою электроны беспрепятственно пересекут его и попадут в n -полупроводник. Плотность потока электронов из p - в n -полупроводник равна

$$j_{p,p} = \frac{1}{4} n_{n,p} V_{\text{ср}}. \quad (34.4)$$

В условиях равновесия встречные потоки электронов (34.3) и (34.4) равны друг другу:

$$\frac{1}{4} n_{n,n} V_{\text{ср}} e^{-\frac{\Delta_{\kappa}}{\kappa T}} = \frac{1}{4} n_{n,p} V_{\text{ср}}.$$

Подставив в это равенство концентрации носителей $n_{n,n}$ и $n_{n,p}$ из (34.1) и (34.2) и выполнив преобразования, получим

$$\xi_n + \Delta_{\kappa} = \xi_p. \quad (34.5)$$

Соотношение (34.5) доказывает совпадение уровней Ферми слева и справа от n - p -перехода (см. рис. 99). Такие же рассуждения и выкладки можно повторить и для дырок.

В области n - p -перехода уровень Ферми находится посередине запрещенной зоны, как это имеет место в чистых полупроводниках. Поскольку чистые полупроводники обладают значительно меньшей электропроводностью, чем примесные (см. § 33), основная часть электрического сопротивления рассматриваемого полупроводника (см. рис. 97) сосредоточена в области n - p -перехода. Это свойство составного проводника можно объяснить и другим способом. Диффундируя во встречных направлениях через пограничный слой, электроны и дырки рекомбинируют друг с другом, что приводит к одновременному исчезновению электрона и дырки. Поэтому n - p -переход оказывается сильно обедненным носителями тока и приобретает большое сопротивление.

Вольт-амперная характеристика *n-p*-перехода. Кристалл с *n-p*-переходом, включенный в состав электрической цепи (см. рис. 101 *а, б*), называется *полупроводниковым диодом*. Полупроводниковый диод представляет собой электротехническое устройство с нелинейной зависимостью силы тока от внешней ЭДС (вольт-амперной характеристикой), которая описывается выражением:

$$I = I_0 \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right), \quad (34.6)$$

где I — сила тока через диод, I_0 — постоянный коэффициент, зависящий от свойств кристалла, U — внешняя ЭДС. График этой зависимости показан на рис. 100. Участок, соответствующий пробое диода, не описывается функцией (34.6).

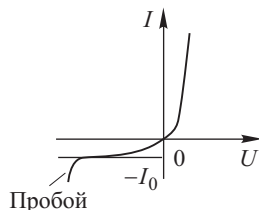


Рис. 100

Внешняя ЭДС U считается положительной при прямом включении, когда плюс подсоединен к *p*-области, минус — к *n*-области полупроводника (рис. 101 *а*), и отрицательной при обратном включении, когда

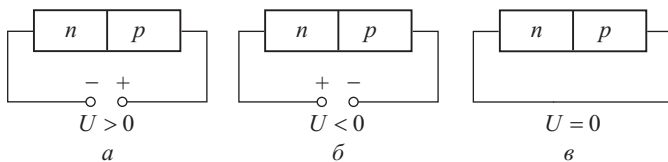


Рис. 101

плюс подсоединен к *n*-области, минус — к *p*-области полупроводника (рис. 101 *б*).

Если при отсутствии внешней ЭДС концы диода накоротко соединить проводником (рис. 101 *в*), то ток в образовавшейся замкнутой цепи не потечет. Причина заключается в том, что разность потенциалов двух областей кристалла с разным типом проводимости, обусловленная *n-p*-переходом, компенсируется скачками потенциала в местах контакта полупроводника с замыкающим цепь проводником, так что сумма скачков потенциала в замкнутом контуре равна нулю. Если $U = 0$, то ток I через диод равен нулю.

На рис. 102 показана зонная структура кристалла в области *n-p*-перехода. Если $U = 0$, уровни Ферми по разные стороны перехода совпадают друг с другом, потенциальный барьер для электронов, движущихся слева направо из *n*- в *p*-область, равен Δ_k (см. рис. 102 *а*). Такой же барьер встречают на своем пути дырки, движущиеся справа налево. Если $U > 0$, высота потенциального барьера уменьшается и становится равной $\Delta_k - eU$, где e — модуль заряда электрона (см. рис. 102 *б*). Если $U < 0$, высота потенциального барьера увеличивается и становится равной $\Delta_k + e|U| = \Delta_k - eU$ (см. рис. 102 *в*).

Ток неосновных носителей через n - p -переход называется *дрейфовым*, ток основных носителей — *диффузионным*.

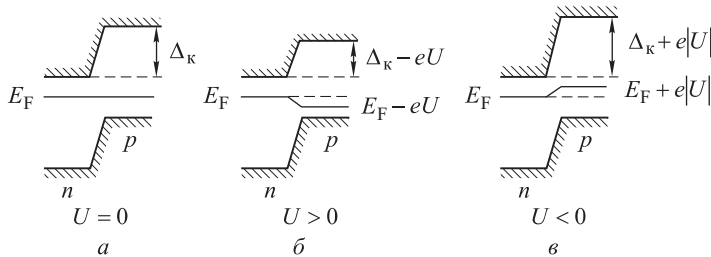


Рис. 102

Введем обозначения для силы токов различных носителей через n - p -переход: $I_{n,n}$ — ток основных носителей (электронов) из n - в p -область, $I_{n,p}$ — ток неосновных носителей (электронов) из p - в n -область, $I_{p,p}$ — ток основных носителей (дырок) из p - в n -область, $I_{p,n}$ — ток неосновных носителей (дырок) из n - в p -область. На рис. 103

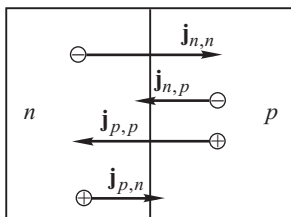


Рис. 103

показаны соответствующие всем перечисленным токам потоки частиц: $\mathbf{j}_{n,n}$, $\mathbf{j}_{p,p}$ — для основных носителей, $\mathbf{j}_{n,p}$, $\mathbf{j}_{p,n}$ — для неосновных.

При пересечении n - p -перехода неосновные носители не встречают на своем пути потенциальных барьеров, напротив, их потенциальная энергия уменьшается: движущиеся по направлению из p - в n -область полупроводника электроны, дойдя до пограничного слоя, беспрепятственно его преодолевают; это же относится ко всем движущимся по направлению из n - в p -область дыркам. По этой причине токи неосновных носителей $I_{n,p}$ и $I_{p,n}$ при включении внешней ЭДС меняться не будут независимо от ее величины и знака.

Токи основных носителей через n - p -переход зависят от высоты потенциального барьера (см. (34.3)) и при включении внешней ЭДС увеличиваются или уменьшаются в $e\frac{U}{\kappa T}$ раз в зависимости от знака U :

$$I_{n,n} = I_{n,p} e^{\frac{eU}{\kappa T}}, \quad (34.7)$$

$$I_{p,p} = I_{p,n} e^{\frac{eU}{\kappa T}}. \quad (34.8)$$

При записи формул (34.7), (34.8) было учтено, что в условиях равновесия диффузионный и дрейфовый токи каждого из носителей равны друг другу, то есть при $U = 0$ $I_{n,n} = I_{n,p}$, $I_{p,p} = I_{p,n}$ (см. текст после формулы (34.4)).

Если на диод подана внешняя ЭДС U , полный ток I через n - p -переход, который представляет собой разность диффузионного и дрейфового токов обоих типов носителей, с учетом (34.7) и (34.8) равен

$$I = I_{n,n} + I_{p,p} - I_{n,p} - I_{p,n} = (I_{n,p} + I_{p,n}) (e^{\frac{eU}{kT}} - 1) = I_0 (e^{\frac{eU}{kT}} - 1),$$

где введено обозначение $I_0 = I_{n,p} + I_{p,n}$ для суммарного тока неосновных носителей. Полученная формула совпадает с (34.6).

Положительная внешняя ЭДС приводит к понижению потенциального барьера и облегчает прохождение через n - p -переход основных носителей. В этом случае ток через диод, называемый *прямым*, быстро возрастает. Допустимая плотность прямого тока через диод составляет величину порядка 10^4 мА/см².

При изменении знака ЭДС потенциальный барьер увеличивается и переходы основных носителей затрудняются. Ток через диод, называемый *обратным*, быстро перестает зависеть от величины U и достигает *тока насыщения* — I_0 . При очень большом обратном напряжении (более 100 В) происходит электрический пробой перехода. Плотность тока насыщения полупроводниковых диодов составляет несколько миллиампер на квадратный сантиметр.

Итак, n - p -переход обладает в обратном направлении гораздо большим сопротивлением, чем в прямом, что позволяет использовать полупроводниковые диоды для выпрямления переменного тока.

§ 35. Транзисторы

Транзистор — это полупроводниковое устройство, содержащее два n - p -перехода. Изготавливаются p - n - p -транзисторы на основе полупроводника p -типа с узкой вставкой полупроводника n -типа и n - p - n -транзисторы на основе полупроводника n -типа со вставкой полупроводника p -типа (рис. 104).

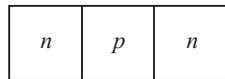


Рис. 104

Средняя часть транзистора называется *базой*. *Эмиттер* — это часть транзистора, на которую подается прямое напряжение. На *коллектор* подается обратное напряжение.

На рис. 105 показана схема включения p - n - p -транзистора. Используются обозначения: $R_{вх}$ — входное сопротивление; $R_{вых}$ — выходное сопротивление; $U_{вх}$ — переменное входное напряжение, которое должно быть усилено; $U_{вых}$ — выходное напряжение; Э — эмиттер, Б — база, К — коллектор. На n - p -переход эмиттер-база подано постоянное прямое напряжение (батарея с ЭДС E_1), на n - p -переход база-коллектор — постоянное обратное напряжение (батарея с ЭДС E_2).

Сопротивление перехода эмиттер-база в результате его прямого включения мало, перехода база-коллектор при обратном поданном на

этот переход напряжении — велико, что позволяет выбрать следующее соотношение между сопротивлениями:

$$R_{\text{вх}} \ll R_{\text{вых}}. \quad (35.1)$$

Благодаря батарее E_1 через переход эмиттер–база течет ток, который резко увеличивает количество неосновных носителей, электронов, в базе. Для них переход база–коллектор является ускоряющим (на пути электронов нет потенциального барьера), так что все электроны сквозь него проходят беспрепятственно. Таким образом, ток эмиттера $I_э$ приблизительно равен току коллектора $I_к$:

$$I_э \approx I_к.$$

Вызванное переменным входным напряжением $U_{\text{вх}}$ изменение тока эмиттера $\Delta I_э$ приводит к изменению тока коллектора $\Delta I_к$, при этом

$$\Delta I_э \approx \Delta I_к. \quad (35.2)$$

Таким образом, ток в цепи эмиттер–база управляет током в цепи база–коллектор. Выразим изменения токов через изменения входного $\Delta U_{\text{вх}}$ и выходного $\Delta U_{\text{вых}}$ напряжений:

$$\begin{aligned} \Delta I_э &= \frac{\Delta U_{\text{вх}}}{R_{\text{вх}}}, \\ \Delta I_к &= \frac{\Delta U_{\text{вых}}}{R_{\text{вых}}}, \end{aligned}$$

и подставим в (35.1):

$$\frac{\Delta U_{\text{вх}}}{R_{\text{вх}}} \approx \frac{\Delta U_{\text{вых}}}{R_{\text{вых}}}.$$

Отсюда с учетом (35.1) получим

$$\frac{\Delta U_{\text{вых}}}{\Delta U_{\text{вх}}} \approx \frac{R_{\text{вых}}}{R_{\text{вх}}} \gg 1.$$

Полученное соотношение показывает, что небольшое изменение входного напряжения $U_{\text{вх}}$ управляет большим изменением выходного напряжения $U_{\text{вых}}$. Следовательно рассматриваемая электрическая цепь с включенным в нее транзистором выполняет роль усилительного каскада. При этом источником мощности служит батарея с большой ЭДС E_2 .

Задачи

10.1. Ширина запрещенной зоны собственного полупроводника равна 1 эВ. Чему равно среднее число заполнения электронами уровня вблизи дна зоны проводимости при температуре 290 К? Увеличится

ли это число, если на полупроводник действует электромагнитное излучение с длиной волны 1,0 мкм; 2,0 мкм?

10.2. Найти зависимость энергии Ферми от температуры T в собственном полупроводнике с шириной запрещенной зоны Δ . Использовать условие равенства концентраций электронов и дырок. Параметры носителей тока заданы: n_n , m_n^* , n_p , m_p^* .

10.3. Спектр носителей тока в валентной зоне многих полупроводников характеризуется несколькими ветвями закона дисперсии $E(k)$, каждой из которых соответствует свой тип дырок. В германии Ge в центре первой зоны Бриллюэна имеются минимумы энергии двух ветвей с эффективными массами $m_{p1}^* = 0,04m_e$ и $m_{p2}^* = 0,34m_e$. Оценить долю η легких дырок от общего их числа в Ge.

10.4. n - p -переход изготовлен из материала, характеризующегося при температуре $T = 300$ К концентрацией собственных носителей $n_i = 2 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$. Концентрации доноров и акцепторов по обе стороны перехода одинаковы и равны $n = 6 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$. Определить величину потенциального барьера на переходе.

10.5. Сопротивление n - p -перехода при малых напряжениях $R = 400 \text{ Ом}$, его площадь $S = 0,5 \text{ см}^2$. Оценить максимальную плотность обратного тока (тока насыщения) j_0 при температуре $T = 300 \text{ К}$.

ЛАЗЕРЫ

§ 36. Вынужденное излучение

Вероятности переходов. Взаимодействие электромагнитного излучения с веществом включает в себя переходы атомов из основного в возбужденное состояние, сопровождаемые поглощением излучения и обратные переходы с испусканием фотонов, которые происходят самопроизвольно и потому называются *спонтанными*. В результате спонтанных переходов атом испускает *спонтанное излучение*. Однако для объяснения существования состояния равновесия между излучением и веществом этих видов взаимодействия недостаточно. Вероятность спонтанных переходов с более высоких на более низкие энергетические уровни зависит лишь от свойств атомов и не зависит от интенсивности падающего на них излучения, а вероятность переходов с более низких на более высокие уровни зависит от обоих перечисленных факторов. Для установления равновесия при произвольной интенсивности падающего излучения должны существовать переходы, сопровождаемые испусканием фотонов, вероятность которых возрастает с увеличением интенсивности излучения.

Такие переходы, как и порождаемое ими излучение, называются *вынужденными* или *индуцированными*.

Рассмотрим модель взаимодействия излучения с веществом. В полость с абсолютно отражающими стенками поместим атом, способный поглощать и испускать электромагнитное излучение частоты ω . Переход атома из состояния с меньшей энергией (состояние 1) в состояние с большей энергией (состояние 2) сопровождается поглощением кванта излучения с энергией $E = \hbar\omega$ (резонансного кванта), обратный переход — испусканием такого же кванта (рис. 106). Переход атома из состояния 1 (2) в состояние 2 (1) называют также

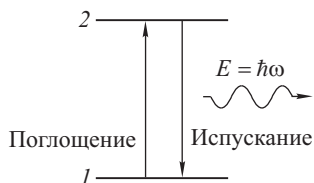


Рис. 106

переходом между уровнями энергии 1 и 2. Кроме того, состояние 2 называется возбужденным, состояние 1 — основным. Пусть в полости имеется монохроматическое электромагнитное излучение с частотой ω , то есть только резонансные кванты.

Введем следующие обозначения:

$W_{21}^{\text{вын}}$ — вероятность вынужденного перехода атома из состояния 2 в состояние 1 за единицу времени при любом числе имеющихся в полости квантов (величина $W_{21}^{\text{вын}}$ зависит от числа квантов);

$W_{21}^{\text{вын.ед}}$ — вероятность вынужденного перехода атома из состояния 2 в состояние 1 за единицу времени при наличии в полости одного кванта;

$W_{21}^{\text{сп}}$ — вероятность спонтанного перехода атома из состояния 2 в состояние 1 за единицу времени (величина $W_{21}^{\text{сп}}$ не зависит от числа квантов и вообще от их наличия или отсутствия в полости);

$W_{12}^{\text{ед}}$ — вероятность перехода атома из состояния 1 в состояние 2 за единицу времени при наличии в полости одного кванта;

Справедливы следующие утверждения.

Утверждение 1. Существуют два вида переходов атома из состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией: а) самопроизвольные или иначе *спонтанные*; б) вызванные электромагнитным излучением, называемые *вынужденными* или *индуцированными*. Двум видам переходов соответствуют и два вида излучения — спонтанное и вынужденное.

Утверждение 2. Вероятность вынужденного перехода атома из состояния 2 в состояние 1 $W_{21}^{\text{вын}}$ пропорциональна числу n имеющихся в полости резонансных квантов.

Утверждение 3. Вероятность $W_{21}^{\text{вын.ед}}$ вынужденного перехода атома из состояния 2 в состояние 1, рассчитанная на один имеющийся в полости квант, равна вероятности $W_{21}^{\text{сп}}$ спонтанного перехода атома из состояния 2 в состояние 1:

$$W_{21}^{\text{вын.ед}} = W_{21}^{\text{сп}}. \quad (36.1)$$

Доказательство. Если атом находится в состоянии 2, то количество резонансных квантов излучения в полости обозначим через n . Тогда если атом находится в состоянии 1, то количество квантов будет на единицу больше и равно $n + 1$. За достаточно большой промежуток времени t атом много раз успевает побывать как в состоянии 1 (суммарное время пребывания в этом состоянии равно t_1), так и в состоянии 2 (суммарное время пребывания равно t_2), при этом $t_1 + t_2 = t$. Обозначим через N_{12} и N_{21} число переходов из первого состояния во второе и обратно за время t .

Число переходов N_{12} пропорционально количеству имеющихся в момент перехода квантов, то есть $n + 1$, и времени t_1 пребывания в состоянии 1:

$$N_{12} = W_{12}^{\text{ед}}(n + 1)t_1. \quad (36.2)$$

Здесь $W_{12}^{\text{ед}}$ — коэффициент пропорциональности, который представляет собой вероятность перехода атома из состояния 1 в состояние 2, отнесенную к одному кванту и к единице времени (иными словами,

$W_{12}^{\text{ед}}$ — это величина, которая получается делением N_{12} на $(n+1)t_1$ при стремлении t_1 и n к бесконечности).

В любой момент времени t числа N_{12} и N_{21} либо равны друг другу, либо отличаются на единицу. При большом t числа N_{12} и N_{21} велики по сравнению с единицей, и потому практически равны друг другу:

$$N_{12} = N_{21}. \quad (36.3)$$

Из (36.2) и (36.3) получаем

$$N_{21} = W_{12}^{\text{ед}}(n+1)t_1 = W_{12}^{\text{ед}}nt_1 + W_{12}^{\text{ед}}t_1. \quad (36.4)$$

Соотношение (36.4) можно интерпретировать следующим образом. Число переходов из состояния 2 в состояние 1 равно сумме двух слагаемых, одно из которых не зависит от числа квантов n и поэтому соответствует спонтанным переходам:

$$N_{21}^{\text{сп}} = W_{12}^{\text{ед}}t_1. \quad (36.5)$$

Другое слагаемое в (36.4) пропорционально n — числу имеющихся в полости квантов в те моменты времени, когда атом находится в состоянии 2. Это слагаемое соответствует вынужденным переходам, то есть переходам, стимулированным электромагнитными квантами. Число вынужденных переходов

$$N_{21}^{\text{вын}} = W_{12}^{\text{ед}}nt_1. \quad (36.6)$$

Таким образом, утверждение 1 можно считать доказанным.

Разделив (36.6) на (36.5), найдем отношение $N_{21}^{\text{вын}}/N_{21}^{\text{сп}}$ числа вынужденных к числу спонтанных переходов за время t . Указанное отношение по определению равно отношению вероятностей вынужденного $W_{21}^{\text{вын}}$ и спонтанного $W_{21}^{\text{сп}}$ перехода атома из состояния 2 в состояние 1:

$$\frac{N_{21}^{\text{вын}}}{N_{21}^{\text{сп}}} = \frac{W_{21}^{\text{вын}}}{W_{21}^{\text{сп}}} = n. \quad (36.7)$$

Формула (36.7) связывает вероятности вынужденного и спонтанного излучения атома при имеющемся в полости количестве резонансных квантов n . Из нее вытекает утверждение 2, согласно которому вероятность вынужденного перехода атома $W_{21}^{\text{вын}}$ пропорциональна числу n имеющихся резонансных квантов.

Из (36.7) при $n = 1$ следует также, что рассчитанная на один квант вероятность вынужденного излучения $W_{21}^{\text{вын.ед}}$ равна вероятности спонтанного излучения $W_{21}^{\text{сп}}$:

$$(W_{21}^{\text{вын}})_{\text{при } n=1} \equiv W_{21}^{\text{вын.ед}} = W_{21}^{\text{сп}}.$$

Тем самым утверждение 3 доказано (см. (36.1)).

Утверждение 4. Можно доказать, что вынужденное излучение характеризуется той же частотой, фазой, поляризацией, тем же направлением распространения, что и излучение, его вызвавшее. Следовательно, *вынужденное и вынуждающее излучения оказываются*

когерентными. Примем это без доказательства. Указанная особенность вынужденного излучения лежит в основе действия усилителей и генераторов света, называемых лазерами (см. § 38).

Найдем соотношение между вероятностями поглощения и испускания электромагнитного излучения. Справедливо следующее утверждение.

Утверждение 5. Вероятность $W_{12}^{\text{ед}}$ перехода атома из состояния 1 в состояние 2 с поглощением электромагнитного кванта равна вероятности вынужденного обратного перехода $W_{21}^{\text{вын.ед}}$, а также вероятности $W_{21}^{\text{сп}}$ спонтанного обратного перехода атома:

$$W_{12}^{\text{ед}} = W_{21}^{\text{вын.ед}} = W_{21}^{\text{сп}}. \quad (36.8)$$

Доказательство. Рассмотрим полость объемом V с абсолютно черными стенками, находящимися при некоторой температуре T . Поместим в нее множество одинаковых невзаимодействующих друг с другом атомов, которые могут переходить из некоторого состояния 1 в состояние 2 с более высокой энергией и обратно. Энергия состояний 1 и 2 отличается на величину $E = \hbar\omega$. Через некоторое время в полости установится тепловое равновесие между стенками, атомами и излучением. В состав излучения входят электромагнитные кванты со всеми возможными значениями энергии и частоты, в том числе резонансные кванты с энергией $E = \hbar\omega$.

Обозначим через n_1 и n_2 отнесенные к единице объема полости числа атомов в состояниях 1 и 2 соответственно. Величины n_1 и n_2 называются *населенностями* энергетических уровней. Число резонансных квантов с энергией $E = \hbar\omega$, находящихся в полости, равно n .

Число N_{12} сопровождаемых поглощением резонансного кванта переходов атомов из состояния 1 в состояние 2 пропорционально полному числу атомов $n_1 V$ в первом состоянии, числу n резонансных квантов и времени наблюдения t :

$$N_{12} = W_{12}^{\text{ед}} n_1 V n t, \quad (36.9)$$

где коэффициент пропорциональности $W_{12}^{\text{ед}}$ — отнесенная на один атом и на один квант вероятность перехода.

Число $N_{21}^{\text{сп}}$ спонтанных переходов атомов из состояния 2 в состояние 1 пропорционально полному числу атомов $n_2 V$ во втором состоянии и времени наблюдения t :

$$N_{21}^{\text{сп}} = W_{21}^{\text{сп}} n_2 V n t, \quad (36.10)$$

где коэффициент пропорциональности $W_{21}^{\text{сп}}$ — вероятность спонтанного перехода одного атома.

Число $N_{21}^{\text{вын}}$ вынужденных переходов атомов из состояния 2 в состояние 1 пропорционально полному числу атомов $n_2 V$ во втором состоянии, числу n резонансных квантов и времени наблюдения t :

$$N_{21}^{\text{вын}} = W_{21}^{\text{вын.ед}} n_2 V n t, \quad (36.11)$$

где коэффициент пропорциональности $W_{21}^{\text{вын.ед}}$ — вероятность вынужденного перехода, отнесенная на один атом и один квант.

При тепловом равновесии число переходов из первого состояния во второе и из второго в первое равны друг другу:

$$N_{12} = N_{21}^{\text{сп}} + N_{21}^{\text{вын}}.$$

Или с учетом (36.9)–(36.11):

$$W_{12}^{\text{ед}} n_1 V n t = W_{21}^{\text{сп}} n_2 V t + W_{21}^{\text{вын.ед}} n_2 V n t. \quad (36.12)$$

Населенности уровней n_1 и n_2 зависят от температуры T , а вероятности $W_{12}^{\text{ед}}$, $W_{21}^{\text{сп}}$, $W_{21}^{\text{вын.ед}}$ зависят только от свойств рассматриваемых атомов и с температурой не связаны.

Рассмотрим соотношение (36.12) при высоких температурах. При повышении температуры число n квантов теплового излучения неограниченно возрастает, поскольку неограниченно возрастает его энергия (см. § 24). Следовательно, в правой части (36.12) можно пренебречь первым слагаемым (числом спонтанных переходов) по сравнению со вторым (числом вынужденных переходов). Тогда:

$$W_{12}^{\text{ед}} n_1 V n t = W_{21}^{\text{вын.ед}} n_2 V n t. \quad (36.13)$$

Кроме того, при повышении температуры исчезает различие в населенностях n_1 и n_2 двух энергетических уровней:

$$n_1 \approx n_2. \quad (36.14)$$

Действительно, в соответствии с распределением Больцмана при $E \ll kT$ отношение населенностей равно:

$$n_2/n_1 = e^{-E/kT} \approx 1.$$

С учетом приближенного равенства (36.14) из (36.13) находим:

$$W_{12}^{\text{ед}} = W_{21}^{\text{вын.ед}}, \quad (36.15)$$

то есть вероятность поглощения электромагнитного излучения равна вероятности вынужденного испускания. Поскольку вероятности $W_{12}^{\text{ед}}$, $W_{21}^{\text{вын.ед}}$ от температуры не зависят, равенство (36.15) справедливо при любой, а не только высокой температуре.

Учитывая (36.1), из (36.15) найдем

$$W_{12}^{\text{ед}} = W_{21}^{\text{вын.ед}} = W_{21}^{\text{сп}}.$$

Утверждение 5 доказано.

Вероятность поглощения и испускания излучения средой. Равенства (36.8), (36.9), (36.11) позволяют получить соотношение между вероятностями вынужденного излучения и поглощения света средой (системой из множества атомов), которые обозначим соответственно через $W_{21\text{ср}}^{\text{вын}}$ и $W_{12\text{ср}}$. Отношение указанных вероятностей равно отношению числа испущенных квантов $N_{21}^{\text{вын}}$ к числу поглощенных квантов

N_{12} за достаточно большое время t . Пусть населенности энергетических уровней 1 и 2 равны n_1 и n_2 . Разделив (36.11) на (36.9) с учетом (36.8), найдем

$$\frac{N_{21}^{\text{вын}}}{N_{12}} = \frac{W_{21\text{ср}}^{\text{вын}}}{W_{12\text{ср}}} = \frac{n_2}{n_1}. \quad (36.16)$$

Таким образом, отношение вероятностей вынужденного излучения и поглощения света активной средой равно отношению населенностей соответствующих энергетических уровней.

В условиях теплового равновесия населенность n_2 более высоко расположенного уровня меньше населенности n_1 уровня с меньшей энергией. Поэтому $N_{21}^{\text{вын}}/N_{12} < 1$ и, следовательно, интенсивность вынужденного излучения меньше интенсивности поглощенного света. В этом случае вынужденное излучение, как правило, на опыте не обнаруживается. Если создать условия, при которых $n_2 > n_1$ (так называемая *инверсная населенность*), то вынужденное излучение будет преобладать над поглощением: $N_{21}^{\text{вын}}/N_{12} > 1$, и среда начнет усиливать свет. Среду с инверсной населенностью называют *активной*.

Коэффициенты Эйнштейна. Соотношения между вероятностями поглощения, вынужденного и спонтанного излучения впервые было получено Эйнштейном в форме, отличной от (36.8), через так называемые *коэффициенты Эйнштейна*. Выразим число n электромагнитных квантов, имеющих фиксированную частоту ω , через спектральную плотность u_ω равновесного теплового излучения в полости с абсолютно черными стенками (см. § 22). Для этого запишем энергию излучения, приходящуюся на интервал частот от ω до $\omega + d\omega$ и соответствующий интервал энергии от E до $E + dE$:

$$u_\omega V d\omega = Eng(E)dE.$$

Здесь $g(E)$ — статистический вес, V — объем полости. Воспользуемся формулой статистического веса (21.12), связью между импульсом p , энергией E и частотой ω электромагнитного кванта $p = E/c = \hbar\omega/c$ и выполним следующие преобразования:

$$u_\omega V d\omega = \hbar\omega n \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} V,$$

$$u_\omega V d\omega = \hbar\omega n \frac{4\pi(\hbar\omega/c)^2 d(\hbar\omega/c)}{(2\pi\hbar)^3} V.$$

Отсюда получаем выражение для числа резонансных квантов n (то есть квантов излучения с частотой ω , соответствующей переходу атома из состояния 1 в состояние 2) через спектральную плотность энергии теплового излучения u_ω :

$$n = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} u_\omega. \quad (36.17)$$

Подставим n из (36.17) в (36.9):

$$N_{12} = W_{12}^{\text{ед}} n_1 V n t = W_{12}^{\text{ед}} n_1 V \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} u_{\omega} t = B_{12} n_1 V u_{\omega} t. \quad (36.18)$$

Здесь величина B_{12} , называемая *коэффициентом Эйнштейна для поглощения*, по определению равна:

$$B_{12} = W_{12}^{\text{ед}} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3}. \quad (36.19)$$

Перепишем равенство (36.10) в следующем виде:

$$N_{21}^{\text{сп}} = W_{21}^{\text{сп}} n_2 V t = A_{21} n_2 V t. \quad (36.20)$$

Здесь величина A_{12} , называемая *коэффициентом Эйнштейна для спонтанного излучения*, по определению равна:

$$A_{21} = W_{21}^{\text{сп}}. \quad (36.21)$$

Подставим n из (36.17) в (36.11):

$$N_{21}^{\text{вын}} = W_{21}^{\text{вын.ед}} n_2 V n t = W_{21}^{\text{вын.ед}} n_2 V \frac{\pi c^3}{2 \hbar \omega^3} u_{\omega} t = B_{21} n_2 V u_{\omega} t. \quad (36.22)$$

Здесь величина B_{21} , называемая *коэффициентом Эйнштейна для вынужденного излучения*, по определению равна:

$$B_{21} = W_{21}^{\text{вын.ед}} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3}. \quad (36.23)$$

Как видно из формул (36.19), (36.21), (36.23), коэффициенты Эйнштейна могут отличаться от введенных ранее вероятностей поглощения, вынужденного и спонтанного излучения атома $W_{12}^{\text{ед}}$, $W_{21}^{\text{вын.ед}}$, $W_{21}^{\text{сп}}$ лишь постоянным множителем. Из (36.18), (36.20), (36.22) следует:

$$W_{12}^{\text{ед}} n = B_{12} u_{\omega}, \quad (36.24)$$

$$W_{21}^{\text{сп}} = A_{21}, \quad (36.25)$$

$$W_{21}^{\text{вын.ед}} n = B_{21} u_{\omega}, \quad (36.26)$$

где u_{ω} — спектральная плотность равновесного теплового излучения на резонансной частоте ω , то есть на частоте перехода атома из состояния 1 в состояние 2; n — число содержащихся в излучении резонансных квантов, $n = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} u_{\omega}$ (см. (36.17)).

Формулы (36.24)–(36.26) иллюстрируют физический смысл коэффициентов Эйнштейна. Так, равенство (36.24) означает, что вероятность перехода атома в возбужденное состояние в присутствии n квантов $W_{12}^{\text{ед}} n$ пропорциональна спектральной плотности излучения u_{ω} , коэффициентом пропорциональности служит B_{12} . В соответствии с (36.25) коэффициент A_{12} совпадает с вероятностью спонтанного перехода атома из возбужденного состояния в основное. Равенство

(36.26) означает, что вероятность вынужденного перехода атома из возбужденного состояния в основное в присутствии n квантов $W_{21}^{\text{вын.ед}} n$ пропорциональна спектральной плотности излучения u_ω , коэффициентом пропорциональности служит B_{21} .

Найдем соотношения между коэффициентами Эйнштейна, учитывая (36.8):

$$B_{21} = W_{21}^{\text{вын.ед}} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} = W_{12}^{\text{ед}} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} = B_{12},$$

$$A_{21} = W_{21}^{\text{сп}} = W_{21}^{\text{вын.ед}} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21}.$$

Коэффициенты Эйнштейна для поглощения и вынужденного излучения равны друг другу:

$$B_{12} = B_{21}; \quad (36.27)$$

а коэффициенты Эйнштейна для спонтанного и вынужденного излучения связаны соотношением:

$$A_{21} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} B_{21}. \quad (36.28)$$

§ 37. Поглощение и излучение света веществом

Будем пропускать через образец вещества электромагнитную волну, частота которой равна частоте перехода между двумя энергетическими уровнями 1 и 2 атомов среды. Населенность нижнего уровня обозначим через n_1 , верхнего — через n_2 (напомним, что населенность уровня равна числу атомов с энергией, равной энергии уровня, отнесенному к единице объема вещества). Определим закон изменения плотности потока световых квантов $j(x)$, где x — координата вдоль направления распространения волны (рис. 107).

При прохождении через вещество величина j будет уменьшаться за счет поглощения световых квантов и увеличиваться за счет вынужденного излучения. В целом приращение dj равно

$$dj = dj_{\text{погл}} + dj_{\text{вын.}} \quad (37.1)$$

Количество поглощенных на расстоянии dx квантов $dj_{\text{погл}}$ пропорционально полному числу квантов $j(x)$ в перпендикулярной к направлению распространения волны плоскости с координатой x , населенности уровня n_1 и толщине слоя dx :

$$dj_{\text{погл}} = -\sigma j n_1 dx, \quad (37.2)$$

где σ — коэффициент пропорциональности.

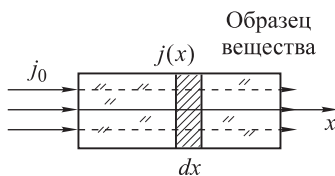


Рис. 107

Количество испускаемых веществом на расстоянии dx квантов $dj_{\text{вын}}$ также пропорционально полному числу квантов $j(x)$, населенности уровня n_2 и толщине слоя dx :

$$dj_{\text{вын}} = \sigma j n_2 dx, \quad (37.3)$$

где σ — коэффициент пропорциональности.

Поскольку вероятности вынужденного излучения и поглощения равны друг другу, коэффициент пропорциональности σ в формулах (37.2) и (37.3) один и тот же; он называется *сечением вынужденного перехода* и зависит только от характеристик конкретного вещества и конкретного перехода между атомными уровнями энергии. Размерность сечения вынужденного перехода — м^2 .

Действительно, величина σ , которая входит в (37.2), пропорциональна вероятности поглощения электромагнитного кванта атомом $W_{12}^{\text{ед}}$, а σ в формуле (37.3) — пропорциональна вероятности вынужденного излучения кванта атомом $W_{21}^{\text{вын.ед}}$. Поскольку вероятности $W_{12}^{\text{ед}}$ и $W_{21}^{\text{вын.ед}}$ равны друг другу (см. (36.8)), коэффициент σ в формулах (37.2) и (37.3) одинаков.

Подставив $dj_{\text{погл}}$ и $dj_{\text{вын}}$ из (37.2) и (37.3) в (37.1), получим

$$dj = \sigma(n_2 - n_1)jdx.$$

Интегрируя это равенство, найдем закон изменения плотности потока световых квантов $j(x)$ при распространении световой волны вдоль координатной оси x :

$$j(x) = j_0 e^{\alpha x}, \quad (37.4)$$

где j_0 — плотность потока в плоскости $x = 0$, через α обозначено произведение сечения перехода и разности населенностей, $\alpha = \sigma(n_2 - n_1)$.

Интенсивность I световой волны пропорциональна потоку световых квантов j , поэтому зависимость $I(x)$ от координаты x подобна (37.4).

В обычных равновесных средах концентрация атомов в состоянии с заданным значением энергии, или иначе говоря, населенность уровня, описывается распределением Больцмана, она уменьшается по мере увеличения энергии состояния. Следовательно в равновесной среде $n_2 < n_1$, $\alpha = \sigma(n_2 - n_1) < 0$ и в соответствии с (37.4) интенсивность света по мере его прохождения через вещество уменьшается. Модуль α в этом случае называется *экстинкцией* вещества, а выражение (37.4) носит название *закона Бугера*.

В неравновесных средах населенность n_2 вышележащего энергетического уровня превосходит населенность n_1 нижележащего уровня (*инверсная населенность*):

$$n_2 > n_1. \quad (37.5)$$

При выполнении условия (37.5) величина $\alpha = \sigma(n_2 - n_1) > 0$, и в соответствии с (37.4) интенсивность света по мере его прохождения через вещество экспоненциально возрастает. Происходит усиление света

за счет вынужденного излучения. В этом случае величина α называется *коэффициентом усиления среды* (или *погонным коэффициентом усиления*, или *показателем усиления среды*):

$$\alpha = \sigma(n_2 - n_1). \quad (37.6)$$

Коэффициент усиления измеряется в обратных метрах или обратных сантиметрах. Физический смысл α заключается в следующем: величина, обратная α , численно равна расстоянию, при прохождении которого в среде с инверсной населенностью интенсивность света увеличивается в e раз.

§ 38. Принцип работы лазера

Лазером или *оптическим квантовым генератором* называется устройство, преобразующее различные виды энергии (световую, электрическую, химическую, тепловую и т.д.) в энергию когерентного электромагнитного излучения оптического диапазона. Устройство лазера во многом определяется тем, какой вид энергии преобразуется в когерентное излучение. В основе работы лазеров лежит процесс вынужденного испускания фотонов возбужденными квантовыми системами — атомами и молекулами газов, твердыми телами, жидкостями и т.д.

Лазер содержит три основные компоненты: активную среду (активный элемент), в которой создают инверсную населенность каких-либо двух энергетических уровней; систему накачки — устройство для создания инверсной населенности; оптический резонатор, представляющий собой два параллельно расположенных зеркала (рис. 108).

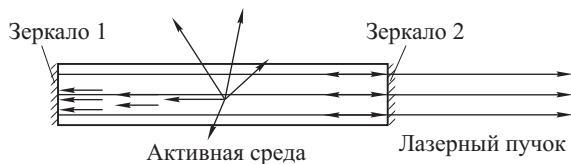


Рис. 108

Как правило, зеркалами резонатора являются торцевые поверхности активного элемента.

После того как благодаря накачке в расположенном внутри резонатора активном элементе достигнута инверсная населенность уровней, возникают многочисленные акты спонтанного излучения фотонов. Те фотоны, которые были испущены перпендикулярно или под большими углами к оси резонатора, покидают активную среду. Фотоны, спонтанно испущенные вдоль оси резонатора, многократно отражаются от его зеркал, вновь и вновь проходят через активный элемент и вызывают в нем акты вынужденного испускания. Каскад фотонов одинакового

направления, практически одинаковых по частоте и фазе, лавинообразно нарастает. В результате возникает когерентное излучение, направленное вдоль оси резонатора. Одно из зеркал резонатора делается полупрозрачным для выхода части излучения. Так формируется пучок лазерного излучения.

Отметим, что во время первого пролета через оптический резонатор усиливаются все испущенные в результате спонтанных процессов фотоны. Частоты (длины волн), соответствующие этим фотонам, различаются между собой в пределах ширины спектральной линии. Благодаря интерференции после отражения от зеркал в преимущественном положении оказываются только те фотоны, для которых выполняется условие существования стоячих волн или иначе условие возникновения интерференционного максимума интенсивности при наложении исходной и отраженной зеркалом волны:

$$n \cdot 2l = m\lambda, \quad (38.1)$$

где n — показатель преломления среды, l — длина резонатора, λ — длина световой волны, m — целое число. Равенство (38.1) означает, что оптическая разность хода $2nl$ любого исходного луча и луча, вернувшегося в точку наблюдения после отражения от зеркал резонатора, равна целому числу длин волн m . Свет с другими длинами волн резонатором не усиливается. Таким образом, за счет оптического резонатора в активной среде многократно распространяются только фотоны определенного направления и определенной длины волны (частоты). Число таких фотонов благодаря вынужденному излучению нарастает.

Условие возникновения генерации. Найдем условие возникновения генерации (самовозбуждения) когерентного излучения в лазере. Оно состоит в том, что интенсивность I света на замкнутом пути, включающем двойное прохождение активного элемента в направлении вдоль оси резонатора и двойное отражение от зеркал, должна превышать или быть равной исходной интенсивности I_0 :

$$I = r_1 r_2 I_0 e^{2\alpha l} \geq I_0, \quad (38.2)$$

где r_1, r_2 — коэффициенты отражения зеркал, α — коэффициент усиления среды, l — длина активного элемента. Множитель $I_0 e^{2\alpha l}$ в соответствии с (37.4) равен интенсивности света, возникающей на длине пути $2l$ в активной среде, если исходная интенсивность I_0 .

Из (38.2) получим условие генерации в следующей форме:

$$r_1 r_2 e^{2\alpha l} \geq 1. \quad (38.3)$$

Отсюда определим пороговое значение коэффициента усиления $\alpha_{\text{пор}}$, при превышении которого начинается генерация:

$$r_1 r_2 e^{2\alpha_{\text{пор}} l} = 1, \quad (38.4)$$

$$\alpha_{\text{пор}} = \frac{\ln(1/r_1 r_2)}{2l}. \quad (38.5)$$

С помощью (38.5) и с учетом выражения (37.6) для α найдем необходимое для возникновения генерации соотношение между населенностями n_1 и n_2 «рабочих» энергетических уровней:

$$n_2 - n_1 \geq \frac{\alpha_{\text{пор}}}{\sigma} = \frac{\ln(1/r_1 r_2)}{2\sigma l}, \quad (38.6)$$

где σ — сечение вынужденного перехода, которое является характеристикой используемого в том или ином лазере вещества активного элемента.

При прохождении света через активную среду генерация лазерного излучения возникает при выполнении более сильного условия (38.6), по сравнению с условием (37.5) усиления света. Повышенное требование к величине инверсной населенности для возникновения генерации обусловлено необходимостью компенсировать потери энергии в лазере, которые складываются из внутренних потерь (поглощение и рассеяние света в активной среде, зеркалах и т. д.) и потерь за счет вывода части генерируемой энергии сквозь зеркало резонатора.

Различают два режима лазерной генерации — импульсный и непрерывный. Если инверсия населенности достигается импульсами, то и генерация когерентного излучения является импульсной, импульс излучения продолжается до тех пор, пока населенности рабочих уровней не сравняются. Если инверсия населенности в активной среде поддерживается за счет внешнего источника длительное время, то имеет место непрерывная генерация.

§ 39. Устройство лазеров

Как обсуждалось выше, общим принципом работы всех лазеров является генерация когерентного света за счет вынужденного излучения электромагнитных квантов частицами активной среды, расположенной между зеркалами оптического резонатора. Устройство конкретных лазеров главным образом зависит от того, какое вещество используется в качестве активной среды. Химической структурой и свойствами активного элемента лазера определяется и способ накачки. Рассмотрим в качестве примера устройство рубинового и полупроводникового лазеров.

Лазер на рубине. Рубином называется кристалл окиси алюминия Al_2O_3 , в котором часть ионов алюминия ($\sim 0,05\%$) заменена ионами хрома Cr^{3+} . Монокристаллам придается форма длинных стержней круглого сечения диаметром около 1 см и длиной 5–10 см (рис. 109). Отполированные строго параллельные торцы рубинового стержня покрываются слоем серебра и служат зеркалами оптического резонатора.

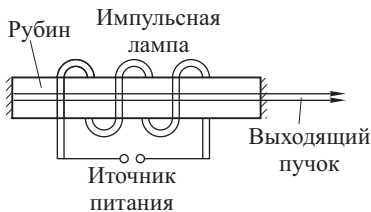


Рис. 109

Одно из зеркал является непрозрачным, другое пропускает около 8% упавшей на него энергии. В рубиновом, как и других твердотельных лазерах, используется оптическая накачка. Рубиновый стержень освещается импульсной ксеноновой лампой спиральной формы, которая дает свет с широкой полосой частот. При этом ионы хрома переводятся из основного в возбужденное состояние.

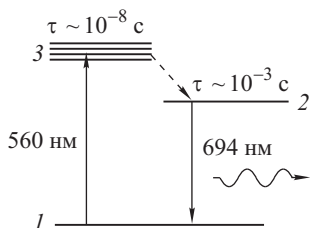


Рис. 110

Схема энергетических уровней иона хрома изображена на рис. 110. При поглощении света с длиной волны 560 нм ион хрома переходит из основного состояния 1 в возбужденное состояние 3, время жизни которого мало и составляет $\sim 10^{-8}$ с. Прямой переход из возбужденного состояния 3 в основное состояние 1 запрещен.

Поэтому сначала возбужденные ионы хрома, отдавая часть своей энергии кристаллической решетке, переходят в метастабильное состояние 2, время жизни которого $\sim 10^{-3}$ с относительно велико (такой уровень называется *метастабильным*). Это способствует быстрому накоплению ионов в состоянии 2 и созданию инверсной населенности: число ионов в состоянии 2 больше, чем в состоянии 1. В качестве рабочего в рубиновом лазере используется переход с метастабильного уровня 2 в основное состояние 1 с излучением фотона с длиной волны $\lambda=694,3$ нм. Генерация начинается самопроизвольно после того, как появится спонтанно излученный вдоль оси рубинового стержня световой квант. Поскольку к исходному кванту добавляются кванты вынужденного излучения, распространяясь по стержню, излучение усиливается. Достигая посеребренного торца стержня излучение возвращается обратно в активную среду, каскад квантов нарастает.

Лазеры на рубине работают в импульсном режиме с частотой порядка нескольких импульсов в минуту. За одно срабатывание лампы-вспышки в лазерное излучение преобразуется несколько джоулей энергии. При полном времени импульса порядка 10^{-3} с средняя мощность лазерного излучения составляет несколько киловатт. Частота повторения импульсов ограничивается перегревом рубинового стержня.

Полупроводниковый лазер. Активным элементом лазера служит полупроводниковый кристалл. В полупроводниковых лазерах используются излучательные квантовые переходы между разрешенными энергетическими зонами — проводимости и валентной, а не между дискретными уровнями энергии. В качестве лазерных материалов применяются GaAs, CdS, PbS и многие другие.

Активными частицами в полупроводниковых лазерах, которые благодаря накачке переходят в возбужденное состояние и затем, испуская электромагнитный квант, возвращаются в основное состояние, служат

избыточные неравновесные электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне, то есть свободные заряды — носители тока (рис. 111).

Инжекционный полупроводниковый лазер представляет собой полупроводниковый диод (монокристалл в форме бруска или, иначе, «чипа»), две плоскопараллельные грани которого, перпендикулярные поверхности n - p -перехода, служат зеркалами оптического резонатора с коэффициентом отражения около 30 % (рис. 112). Инверсия населенности разрешенных зон достигается при большом прямом токе через диод за счет *инжекции*

(введения) избыточных носителей в прилегающие к n - p -переходу области кристалла — электронов в зону проводимости полупроводника p -типа и дырок в валентную зону полупроводника n -типа (см. вольт-амперную характеристику полупроводникового диода, § 34).

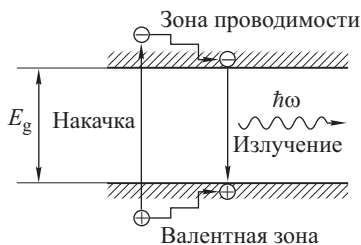


Рис. 111

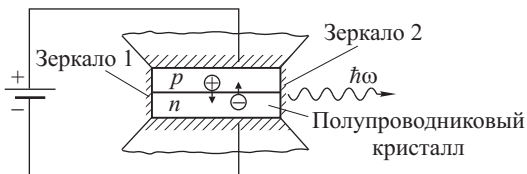


Рис. 112

Таким образом, способом накачки полупроводникового лазера рассматриваемого типа является инжекция через n - p -переход, позволяющая осуществить непосредственное преобразование электрической энергии в когерентное излучение. Полупроводниковые лазеры работают как в импульсном, так и непрерывном режиме.

Генерация когерентного излучения с частотой ω , определяемой шириной E_g запрещенной зоны ($\hbar\omega = E_g$), возникает, если оптическое усиление способно превзойти потери энергии, связанные с поглощением и рассеянием излучения внутри резонатора и выводом излучения наружу. Плотность порогового тока в инжекционных лазерах обычно $\sim 0,2$ – $1,0$ кА/см², однако благодаря малым размерам активного элемента пороговый ток для получения непрерывной генерации при температуре $T = 300$ К достаточно мал и составляет 5–150 мА. Мощность излучения полупроводниковых лазеров в непрерывном режиме составляет порядка 100 мВт и ограничена перегревом активной области. В коротких импульсах полупроводниковые лазеры испускают большую мощность (до 100 Вт), которая ограничена оптическим разрушением торцевых граней кристалла.

В полупроводниковой активной среде достигается большой коэффициент усиления α (см. (37.6)): типично 10^2 – 10^3 см $^{-1}$. Условие возникновения генерации (38.4):

$$r_1 r_2 e^{2\alpha_{\text{пор}} l} = 1$$

позволяет оценить размер активного элемента лазера l . Если произведение коэффициентов отражения зеркал приблизительно равно $r_1 r_2 \sim \sim 0,3$ и $\alpha \sim 10^2$ см $^{-1}$, то длина резонатора l около 50 мкм. Типичный размер активного элемента полупроводниковых лазеров составляет 200–300 мкм.

Помимо компактности, особенностями полупроводникового лазера являются малая инерционность (время срабатывания $\sim 10^{-9}$ с), высокий коэффициент полезного действия (до 50 %), возможность плавной спектральной перестройки, большой выбор веществ для генерации в широком спектральном диапазоне (от 300 до 45 000 нм). К достоинствам полупроводниковых лазеров относятся также их совместимость с полупроводниковыми приборами других типов и возможность монолитной интеграции, электронное управление режимом генерации и параметрами излучения, возможность высокочастотной модуляции излучения путем модуляции тока накачки, низковольтность электропитания (1–3 В), а также наибольшую среди лазеров других типов долговечность (до 10^5 ч).

Полупроводниковые лазеры находят широкое применение в устройствах записи и воспроизведения информации, лазерных принтерах, волоконно-оптических системах связи, в автоматике и телеметрии, научных исследованиях и т. д.

Задачи

11.1. В какой области спектра равновесного теплового излучения при температуре $T = 300$ К интенсивность вынужденного излучения превосходит интенсивность спонтанного?

11.2. Определить диапазон длин волн электромагнитного излучения, в котором вероятность спонтанного перехода более чем в 100 раз превосходит вероятность вынужденного перехода под влиянием равновесного теплового излучения комнатной температуры.

11.3. Возбужденный атом с энергией возбуждения $E = 1$ эВ находится в поле равновесного теплового излучения с температурой $T = 300$ К. Найти отношение вероятности вынужденного и спонтанного излучения атома.

11.4*. Найти условие самовозбуждения генерации света в резонаторе лазера, если он состоит из двух плоскопараллельных зеркал и заполнен газом двухуровневых молекул. Спонтанное время жизни молекул на верхнем уровне равно $\tau_{\text{сп}}$, полная ширина спектра излучения молекул равна $\Delta\nu$, расстояние между зеркалами L , коэффициент отражения зеркал R . Все потери излучения происходят на зеркалах.

ОТВЕТЫ К ЗАДАЧАМ

$$1.1. l_0 = l \sqrt{\frac{1 - \beta^2 \sin^2 \theta}{1 - \beta^2}} = 1,08 \text{ м, где } \beta = V/c.$$

$$1.2. l_0 = c \Delta t' \sqrt{1 - (\Delta t / \Delta t')^2} = 4,5 \text{ м.}$$

$$1.3. s = c \Delta t \sqrt{1 - (\Delta t_0 / \Delta t)^2} = 5 \text{ м.}$$

$$1.4. V' = \frac{[(V_x - V)^2 + V_y^2(1 - V^2/c^2)]^{1/2}}{1 - V_x V/c^2}.$$

$$1.5. l = l_0 \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2}, \text{ где } \beta = V/c.$$

1.6. $V = \frac{c\sqrt{\eta(2+\eta)}}{1+\eta} = 0,6c$, где c — скорость света. Использовано определение плотности как отношения массы покоя тела к его объему.

$$1.7. A = 0,42 mc^2, \text{ вместо } 0,14 mc^2.$$

$$1.8. p = \sqrt{T(T + 2mc^2)} / c = 1,09 \text{ ГэВ}/c, \text{ где } c — \text{ скорость света.}$$

$$1.9. V = Fct / \sqrt{m^2 c^2 + F^2 t^2}, l = \sqrt{(mc^2/F)^2 + c^2 t^2} - mc^2 / F.$$

$$2.1. \text{ а) } \langle j \rangle = \frac{P\lambda}{8\pi^2 \hbar r^2} = 6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}; \text{ б) } r = \frac{\sqrt{P\lambda/2\hbar n}}{2\pi c} = 9 \text{ м.}$$

$$2.2. \langle p \rangle = \frac{4(1+\rho)E}{\pi d^2 c \tau} \approx 5,0 \text{ МПа (50 атм).}$$

$$2.3. 332 \text{ нм; } 6,6 \cdot 10^5 \text{ м/с.}$$

$$2.4. A = \frac{2\pi c \hbar (\eta^2 - \lambda_2 / \lambda_1)}{\lambda_2 (\eta^2 - 1)} = 1,9 \text{ эВ.}$$

$$2.6. T = \frac{\hbar \omega \eta}{1 + \eta} = 0,20 \text{ МэВ.}$$

$$2.7. \hbar \omega' = \frac{\hbar \omega}{1 + 2(\hbar \omega / mc^2) \sin(\theta/2)} = 0,144 \text{ МэВ.}$$

$$2.8. \lambda = \frac{2\pi \hbar}{mc} (\sqrt{1 + 2mc^2/T_{\max}} - 1) = 3,7 \text{ пм.}$$

$$2.9. \lambda = \frac{2\lambda_1 \lambda_2}{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}}.$$

$$2.10. \lambda_{\text{вер}} = \pi \hbar / \sqrt{mkT} = 0,09 \text{ нм.}$$

$$2.11. V = 4\pi \hbar l / mb \Delta x = 2,0 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

$$2.12. \Delta x \approx \frac{\hbar}{m \Delta x_0} t \approx 10^3 \text{ км.}$$

$$2.13. \Delta V/V \sim \frac{\hbar}{l\sqrt{2mT}} = 1 \cdot 10^{-4}.$$

$$2.14. \Delta x \approx \frac{\hbar l}{d\sqrt{2meU}} \sim 10^{-6} \text{ см.}$$

2.15. $E_{\min} \approx \hbar\sqrt{\varkappa/m} = \hbar\omega$, где ω — круговая частота осциллятора. Точный расчет дает $\hbar\omega/2$.

$$3.1. \text{ а) Решение. } \frac{d}{dx}x\psi = \psi + x\frac{d\psi}{dx} = \left(1 + \frac{d}{dx}\right)\psi.$$

$$3.2. (2-x)^2 \cos x - 4x \sin x.$$

$$3.3. (1+3x+x^2)e^x.$$

$$3.5. \langle r \rangle = a/2.$$

$$3.6. \langle U \rangle = \frac{\hbar}{4}\sqrt{2\varkappa/m}.$$

$$3.7. \text{ а) } \langle x \rangle = 0; \text{ б) } \langle p_x \rangle = \hbar k.$$

$$4.1. l = \pi\hbar\sqrt{\frac{n_2^2 - n_1^2}{2m\Delta E}} = 2,5 \text{ нм.}$$

$$4.2. P = 1/3 + \sqrt{3}/2\pi = 0,61.$$

$$4.3. \frac{dN}{dE} = \frac{l}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}; \text{ при } E = 1 \text{ эВ } dN/dE = 0,8 \cdot 10^7 \text{ уровней на } 1 \text{ эВ.}$$

4.4. а) $E = \frac{(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, где n_1, n_2, n_3 — целые числа, не равные нулю; б) $\Delta E = \pi^2\hbar^2/ma^2$; в) для 6-го уровня $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 14$ и $E = 7\pi^2\hbar^2/ma^2$; число состояний равно шести (оно равно числу перестановок тройки чисел 1, 2 и 3).

$$4.5. \text{ а) } R = (k_1 - k_2)^2/(k_1 + k_2)^2, \text{ где } k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar, k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar; \text{ б) } x_{\text{эф}} = 1/2\varkappa, \text{ где } \varkappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar.$$

$$4.6. 1) A_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \approx 3,3 \cdot 10^{-10} \text{ см; } 2) \varkappa T \geq \hbar\omega, T \geq 3000 \text{ К.}$$

$$4.7. E = (7/2)\hbar\omega; n = 2; \alpha = -2\mu\omega/3\hbar; \beta = \mu\omega/2\hbar; A = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4}.$$

5.1. $E_{\text{св}} = \mu k^2 e^4 / 2\hbar^2$, $R = \mu k^2 e^4 / 2\hbar^3$, где μ — приведенная масса системы. Без учета движения ядра эти величины для атома водорода больше на $m/M \approx 0,055\%$, где m и M — массы электрона и протона. $K = 1/(4\pi\varepsilon_0)$ (СИ), $k = 1$ (СГС).

$$5.2. E_D - E_H = 3,7 \text{ мэВ, } \lambda_H - \lambda_D = 33 \text{ пм.}$$

5.3. $\varphi_0 = \int k(\rho/r) 4\pi r^2 dr = -ke/r_1$, где $\rho = -e\psi^2$ — объемная плотность заряда, ψ — нормированная волновая функция, $k = 1/(4\pi\varepsilon_0)$.

$$5.4. \text{ а) } r_{\text{вер}} = r_1; \text{ б) } \langle F_{\text{кул}} \rangle = 2ke^2/r_1^2; \text{ в) } \langle U \rangle = -ke^2/r_1; k = 1/(4\pi\varepsilon_0).$$

$$5.5. 3S_{1/2}, 3P_{1/2}, 3P_{3/2}, 3D_{3/2}, 3D_{5/2}.$$

5.6. Для состояния 4P : $\hbar\sqrt{3}/2$, $\hbar\sqrt{15}/2$, $\hbar\sqrt{35}/2$; для состояния 5D : 0 , $\hbar\sqrt{2}$, $\hbar\sqrt{6}$, $\hbar\sqrt{12}$, $\hbar\sqrt{20}$.

5.7. 3, 4, 5.

5.8. а) 1, 3, 5, 7, 9; б) 2, 4, 6; в) 5, 7, 9.

5.9. а) $g = 2$, за исключением синглетного состояния; б) $g = 1$.

5.10. а) $-2/3$; б) 0; в) 1; г) $5/2$; д) $0/0$.

5.11. $\mu = \mu_B \sqrt{35}$ (${}^6S_{5/2}$).

$$6.1. dN_\omega = \frac{l}{\pi V} d\omega.$$

$$6.2. dN_\omega = \frac{S}{2\pi V^2} \omega d\omega.$$

$$6.4. N(E)dE = \frac{V\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE.$$

6.5. При условии $e^{\frac{E-E_F}{kT}} \gg 1$.

$$7.1. T_2 = \frac{bT_1}{b + T_1 \Delta \lambda} \approx 1750 \text{ K}.$$

$$7.2. \lambda_m = 3,4 \text{ мкм}.$$

$$7.3. T_2 = T_1 \sqrt{d/2l} \approx 400 \text{ K}.$$

7.4. а) $C_V = (\partial U / \partial T)_V = 16\sigma T^3 V / c = 3 \text{ нДж/К}$, где $U = 4\sigma T^4 / c$;
б) $S = 16\sigma T^3 V / 3c = 1,0 \text{ нДж/К}$.

$$7.5. Vt^3 = \text{const}.$$

$$8.1. \text{ а) } \Theta_D = \frac{\hbar}{k} \pi V n_0; \text{ б) } \Theta_D = \frac{\hbar}{k} V \sqrt{4\pi n_0}; \text{ в) } \Theta_D = \frac{\hbar}{k} V \sqrt[3]{6\pi^2 n_0}.$$

$$8.2. \omega = \frac{\pi}{20} \frac{s}{a} \approx 1,05 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}.$$

$$8.3. \left. \frac{n(\omega_D)}{n(\omega_D/2)} \right|_{T=\Theta_D} = 4 \frac{\sqrt{e}-1}{e-1} \approx 1,5; \left. \frac{n(\omega_D)}{n(\omega_D/2)} \right|_{T=\Theta_D/10} = 4 \frac{e^5-1}{e^{10}-1} \approx 0,027.$$

$$8.4. C_V(\text{Be}) = \frac{12\pi^4}{5} n_{\text{Be}} \left(\frac{T}{\Theta_{\text{Be}}} \right)^3, \quad C_V(\text{Cu}) = 3n_{\text{Cu}} k, \text{ где } n_{\text{Be}} \text{ и } n_{\text{Cu}} - \text{число атомов в единице объема кристалла; } n_{\text{Be}}/n_{\text{Cu}} = \\ = \rho_{\text{Be}} M_{\text{Cu}} / \rho_{\text{Cu}} M_{\text{Be}} \approx 1,44; \frac{C_V(\text{Be})}{C_V(\text{Cu})} = \frac{12\pi^4}{5} \frac{n_{\text{Be}}}{n_{\text{Cu}}} \left(\frac{T}{\Theta_{\text{Be}}} \right)^3 \approx 1,1.$$

$$9.1. E_F \approx 9,66 \text{ эВ}; p_F = \hbar(3\pi^2 n)^{1/3} \approx 1,5 \cdot 10^{-24} \text{ кг}\cdot\text{м/с}; V_F = \\ = p_F / m^* \approx 2,07 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

$$9.2. E_{\text{ср}} = \frac{3}{5} N E_F, \text{ где } E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2m^*}, n = N/V - \text{концентрация электронов, } N - \text{полное число электронов, } V - \text{объем кристалла}.$$

$$9.3. U/E_F = \frac{2me^2}{\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3} n^{1/3}} \approx 1,3.$$

$$9.4. \text{Плотность электронов } n = 1/a^3, \text{ концентрация рассеивающих} \\ \text{центров} - \text{атомов никеля } n_1 = 0,01 n; \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2 \tau}{m} = \frac{ne^2}{mn_1 \sigma V_F}, V_F = \\ = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3} \approx \frac{3\hbar}{ma}, \sigma = 100 e^2 \frac{\rho a}{3\hbar} = 3 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2.$$

9.5. Теплоемкость решетки в расчете на 1 моль: $C_{\text{реш}}(T) = \frac{12\pi^4}{5}R \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$; $C_{\text{реш}}(3K) \approx 6 \cdot 10^{-4}R$; $C_{\text{реш}}(300K) \approx 2R$. Электронная теплоемкость в расчете на 1 моль: $C_{\text{эл}}(T) = \left(\frac{\pi}{3n}\right)^{2/3} \frac{m_e \kappa^2 T}{\hbar^2} N_A$; $C_{\text{эл}}(3K) \approx 2,32 \cdot 10^{-4}R$; $C_{\text{эл}}(300K) \approx 2,32 \cdot 10^{-2}R$.

9.6. $C_{\text{эл}} = \frac{9}{2} \kappa \frac{T}{E_F} N_A \approx 5,05 \cdot 10^{-4} \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}$.

10.1. $n(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(\kappa T)} + 1} = \frac{1}{e^{20} + 1} \approx 2,06 \cdot 10^{-9}$. Если $\lambda_1 = 1 \text{ мкм}$ энергия кванта $E_1 = 2\pi c \hbar / \lambda = 1,24 \text{ эВ}$; если $\lambda_2 = 2 \text{ мкм}$, то $E_2 = 0,62 \text{ эВ}$. Излучение с длиной волны 2 мкм не изменяет вероятность перехода электрона в зону проводимости.

10.2. $E_F(T) = -\frac{\Delta}{2} + \frac{3}{4} \kappa T \ln \frac{m_{p*}}{m_{n*}}$.

10.3. $\eta = \frac{n_{p1}}{n_{p1} + n_{p2}} = \frac{m_{p1}^{3/2}}{m_{p1}^{3/2} + m_{p2}^{3/2}} \approx 0,04$.

10.4. $eV = -2\kappa T \ln \frac{n_i}{n} \approx 0,75 \text{ эВ}$.

10.5. $j_0 = \frac{\kappa T}{eSR} \approx 1,28 \text{ А/м}^2$.

11.1. $\lambda \geq \frac{2\pi c \hbar}{\kappa T \ln 2} = 692 \text{ мкм}$.

11.2. Решение. $\frac{W_{21}^{\text{вын}}}{W_{21}^{\text{сп}}} = n = \frac{1}{e^{\hbar\omega/(\kappa T)} - 1}$, где n — число квантов с энергией $\hbar\omega$, ω — частота перехода; $W_{21}^{\text{вын}}/W_{21}^{\text{сп}} < 0,01$ при $\omega > \frac{\kappa T}{\hbar} \ln 101$, $\lambda < 2\pi c \hbar / (\kappa T) \ln 101 \approx 11 \text{ мкм}$.

11.3. $\frac{W_{21}^{\text{вын}}}{W_{21}^{\text{сп}}} = n = \frac{1}{e^{E/(\kappa T)} - 1} \approx e^{-\frac{E}{\kappa T}} \approx 1,6 \cdot 10^{-17}$.

11.4*. Условие генерации $N_2 - N_1 \geq \frac{8\pi\nu^2 u_\nu}{c^2} \frac{1-R}{L} \tau_{\text{сп}}$, где N_1, N_2 — концентрации молекул на нижнем и верхнем уровнях (населенности), u_ν — спектральная плотность энергии теплового излучения на частоте перехода ν между этими уровнями.

ПРИЛОЖЕНИЯ

I. Основные определения и формулы

Кинематика и динамика специальной теории относительности

Лорентцево сокращение длины и замедление хода движущихся часов:

$$l = l_0 \sqrt{1 - \beta^2}, \quad \Delta t = \frac{\Delta t_0}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

где l_0 — собственная длина; Δt_0 — собственное время движущихся часов; V — скорость стержня, часов; c — скорость света в вакууме; $\beta = V/c$.

Преобразования Лорентца. Формулы преобразования координат и времени некоторого события при переходе от одной инерциальной системы отсчета к другой («штрихованная» система отсчета движется со скоростью V в положительном направлении оси x «нештрихованной» системы, причем оси x' и x совпадают, а оси y' и y , z' и z параллельны):

$$x = \frac{x' + Vt'}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad y = y', \quad z = z', \quad t = \frac{t' + x'V/c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}};$$

формулы обратного перехода:

$$x' = \frac{x - Vt}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = \frac{t - xV/c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

где $\beta = V/c$, c — скорость света в вакууме.

Преобразование скорости:

$$V'_x = \frac{V_x - V}{1 - V_x V/c^2}, \quad V'_y = \frac{V_y \sqrt{1 - \beta^2}}{1 - V_x V/c^2}, \quad V'_z \text{ преобразуется аналогично } V'_y.$$

Импульс релятивистской частицы:

$$\mathbf{p} = m\mathbf{V} = \frac{m_0 \mathbf{V}}{\sqrt{1 - \beta^2}},$$

где \mathbf{V} — скорость частицы, m_0 — масса покоящейся частицы, m — масса частицы, движущейся со скоростью V (релятивистская масса).

Масса частицы, движущейся со скоростью V :

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

Основное уравнение релятивистской динамики:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F},$$

где \mathbf{p} — релятивистский импульс.

Кинетическая энергия T релятивистской частицы:

$$T = mc^2 - m_0c^2,$$

где m_0 — масса покоя, m — масса частицы при скорости V .

Полная энергия E частицы:

$$E = mc^2,$$

где c — скорость света в вакууме, m — масса частицы, движущейся со скоростью V .

Связь между полной энергией E и импульсом p релятивистской частицы:

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4.$$

Корпускулярно-волновой дуализм

Фотоэффект — явление вырывания электронов из вещества, в частности, поверхности металла, под действием электромагнитного излучения.

Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта выражает закон сохранения энергии в процессе поглощения электромагнитного кванта электроном вещества:

$$\hbar\omega = T_{\text{вырв}} + A,$$

где $\hbar\omega$ — энергия кванта, $T_{\text{вырв}}$ — кинетическая энергия перешедшего во внешнюю среду электрона, A — *работа выхода* электрона из металла.

Красная граница фотоэффекта — наименьшая частота ω_0 (и соответствующая ей длина волны λ_0) электромагнитного излучения, способного вызвать фотоэффект:

$$\omega_0 = \frac{A}{\hbar}.$$

Эффект Комптона — упругое рассеяние электромагнитного излучения на свободных и слабо связанных электронах вещества, сопровождаемое увеличением длины волны. Наблюдается при рассеянии излучения малых длин волн — рентгеновского ($\lambda \sim 0,1$ нм) и гамма-излучений ($\lambda < 0,1$ нм). Величина комптоновского смещения (изменения длины волны):

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta),$$

где $\lambda_c = 2\pi\hbar/(m_0c)$ — комптоновская длина волны электрона, $\lambda_c \approx 0,2426 \cdot 10^{-11}$ м; m_0 — масса покоя электрона; θ — угол рассеяния.

Постулат де Бройля. Всякой движущейся частице независимо от ее природы и размеров можно поставить в соответствие волну (волна де Бройля). Связь между энергией E движущейся частицы и частотой ω волны:

$$E = \hbar\omega;$$

между импульсом p и волновым числом k :

$$p = \hbar k,$$

где $k = 2\pi/\lambda$.

Длина волны де Бройля λ частицы, обладающей импульсом p :

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Уравнение волны де Бройля частицы с энергией E и импульсом \mathbf{p} :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp \left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{r}) \right],$$

где ψ_0 — постоянная величина (амплитуда волны).

Волна де Бройля соответствует частице с определенными (фиксированными) энергией E и импульсом \mathbf{p} , то есть частице, движущейся в свободном от силовых полей пространстве.

Волны де Бройля распространяются, интерферируют и испытывают дифракцию по обычным законам волновой оптики.

Величина $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ представляет собой плотность вероятности обнаружения частицы в точке пространства, положение которой задано радиусом-вектором \mathbf{r} , в момент времени t . Это утверждение справедливо для любой квантовомеханической волновой функции, а не только волны де Бройля.

Принцип неопределенности Гейзенберга. Координата частицы и ее импульс не могут быть измерены одновременно с абсолютной точностью. Соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \approx 2\pi\hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \approx 2\pi\hbar.$$

Математические основы квантовой механики

Оператор физической величины f (любого физического параметра, характеризующего частицу) — это математический оператор, который позволяет по ψ -функции частицы найти среднее значение физической величины $\langle f \rangle$.

Правило нахождения среднего. Пусть частица движется вдоль координатной оси x (одномерное движение), $\psi(x)$ — ее волновая функция, \hat{f} — оператор некоторой физической величины f . Среднее

значение физической величины f , обозначаемое как $\langle f \rangle$, равно:

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{f} \psi(x) dx,$$

где $\psi^*(x)$ — функция, комплексно-сопряженная с $\psi(x)$.

Оператор координаты:

$$\hat{x} = x.$$

Оператор проекции импульса:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Оператор потенциальной энергии:

$$\hat{U}(x) = U(x).$$

Оператор кинетической энергии:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Оператор полной механической энергии:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x).$$

Оператор проекции момента импульса:

$$\hat{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Собственной функцией оператора физической величины \hat{f} называется функция $\psi(x, y, z)$, которая является решением уравнения:

$$\hat{f}\psi = f_0\psi,$$

где f_0 — некоторое число. Функция $\psi(x, y, z)$ — конечная, однозначная, непрерывная, гладкая.

Собственными значениями физической величины \hat{f} называются числа f_0 , для которых решения предыдущего уравнения существуют.

Собственным состоянием физической величины \hat{f} называется такое состояние частицы (физической системы), в котором \hat{f} имеет определенное (фиксированное) значение.

Стационарным состоянием называется собственное состояние энергии частицы (физической системы).

Уравнение Шредингера для стационарных состояний частицы (физической системы):

$$\hat{H}\psi = E_0\psi,$$

где $\psi = \psi(x, y, z)$ — собственная функция оператора полной энергии \hat{H} (волновая функция стационарного состояния), E_0 — собственное значение энергии.

Временное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, y, z, t).$$

Туннельный эффект — проникновение частицы через потенциальный барьер (относительный максимум потенциальной энергии), при условии, что энергия частицы меньше высоты барьера.

Проницаемость потенциального барьера D — отношение плотностей вероятности обнаружения частицы непосредственно за и перед барьером.

Проницаемость D потенциального барьера произвольной формы:

$$D = \exp \left[-2 \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)/\hbar^2} dx \right].$$

Энергия квантового гармонического осциллятора:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega,$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ — квантовое число.

Атомная физика

Радиусы боровских орбит r_n водородоподобного иона (Ze — заряд ядра, m — масса электрона, $k=1/4\pi\epsilon_0$):

$$r_n = \frac{\hbar^2 n^2}{kZe^2 m}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Энергия атома в модели Бора:

$$E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Волновая функция электрона в водородоподобном атоме зависит от четырех квантовых чисел n, l, m_l, m_s :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \psi_{n,l,m_l,m_s}(r, \theta, \varphi).$$

Главное квантовое число n определяет энергию водородоподобного атома E_n :

$$E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Азимутальное квантовое число l определяет модуль орбитального углового момента M_l :

$$M_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Магнитное квантовое число m_l определяет проекцию орбитального момента на ось z :

$$M_{lz} = m_l \hbar; \quad m_l = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l.$$

Спиновое квантовое число s определяет модуль собственного момента импульса (спина) электрона:

$$M_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad s = \frac{1}{2}.$$

Спиновое квантовое число m_s определяет проекцию спина электрона на произвольную ось z :

$$M_{sz} = m_s \hbar; \quad m_s = \pm \frac{1}{2}.$$

Вырожденные состояния — состояния с одинаковой энергией, но различными наборами квантовых чисел (разными волновыми функциями).

Кратность вырождения энергетического уровня равна числу соответствующих этому уровню различных квантовых состояний. Кратность вырождения уровня E_n водородоподобного атома равна $2n^2$, где n — главное квантовое число.

Обобщенная формула Бальмера позволяет вычислить частоты всех линий спектра атома водорода:

$$\omega = R \left(\frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_n^2} \right),$$

где n_n, n_k — значения главного квантового числа, соответствующие начальному и конечному уровням энергии электрона при испускании атомом света с частотой ω ; R — константа, называемая *постоянной Ридберга*,

$$R = \frac{k^2 e^4 m}{2 \hbar^3}.$$

Магнетон Бора равен

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2m}.$$

Квадрат орбитального магнитного момента электрона:

$$\mu_l^2 = \mu_B^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Проекция орбитального магнитного момента электрона на ось z :

$$\mu_{lz} = -\mu_B m_l, \quad m_l = -l, -(l+1), \dots, 0, \dots, (l-1).$$

Проекция на некоторое выделенное направление z спинного магнитного момента электрона μ_{sz} :

$$\mu_{sz} = \pm \mu_B.$$

Векторы полного углового момента \mathbf{j} и составляющей μ_j по направлению \mathbf{j} вектора полного магнитного момента $\boldsymbol{\mu}$ электрона в атоме связаны соотношением:

$$\boldsymbol{\mu}_j = -g\mu_B\mathbf{j},$$

где μ_j выражен в магнетонах Бора, \mathbf{j} — в единицах \hbar ; g — коэффициент пропорциональности (*фактор Ланде*).

Фактор Ланде:

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}.$$

Основы квантовой статистики

Фермионы — частицы, которые подчиняются принципу Паули и описываются статистикой Ферми–Дирака (все элементарные частицы с полуцелым спиновым квантовым числом s : электроны, протоны, нейтрино и др.).

Бозоны — частицы, которые не подчиняются принципу Паули и описываются статистикой Бозе–Эйнштейна (все элементарные частицы с нулевым или целым спиновым квантовым числом s : фотоны, π - и K -мезоны и др.).

Статистический вес равен

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE},$$

где $dN(E)$ — количество энергетических уровней (квантовых состояний физической системы), приходящихся на интервал энергий dE .

Распределение Бозе–Эйнштейна частиц с нулевой массой покоя:

$$n_{\text{фот}} = \frac{1}{e^{E/(\kappa T)} - 1},$$

где E — энергия квантового состояния, T — абсолютная температура системы частиц, κ — постоянная Больцмана.

Распределение Бозе–Эйнштейна для частиц с отличной от нуля массой покоя:

$$n_{\text{боз}} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} - 1},$$

где E — энергия квантового состояния, T — абсолютная температура системы частиц, κ — постоянная Больцмана, μ — *химический потенциал*. Химический потенциал μ определяется из уравнения:

$$N_0 = \int_0^\infty \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} - 1} g(E) dE,$$

где N_0 — полное число частиц.

Распределение Ферми–Дирака:

$$n_{\text{ферм}} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} + 1} = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(\kappa T)} + 1},$$

где E — энергия квантового состояния, T — абсолютная температура системы частиц, κ — постоянная Больцмана, $\mu \equiv E_F$ — химический потенциал газа или *энергия Ферми*. Химический потенциал μ определяется из уравнения:

$$N_0 = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{(E-\mu)/(\kappa T)} + 1} g(E) dE,$$

где N_0 — полное число частиц.

Статистический вес системы частиц (статистического ансамбля) в объеме V , каждая из которых характеризуется спиновым квантовым числом J :

$$g(E) = \frac{dN(E)}{dE} = (2J+1) \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3 dE}.$$

Здесь

$$d\Gamma = 4\pi p^2 dp V$$

— элементарный объем в фазовом пространстве, который соответствует частицам, модуль импульса которых принадлежит интервалу $(p, p + dp)$, волновое число k — интервалу $(k, k + dk)$, энергия E — интервалу $(E, E + dE)$, и которые заключены в объеме V координатного пространства (связь между всеми перечисленными параметрами следует из соотношений $E = \hbar ck = pc$).

Статистический вес *фотонного газа*:

$$g_{\text{фот}}(E) = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi\hbar)^3 dE} = 2 \frac{4\pi p^2 dp V}{(2\pi\hbar)^3 dE} = \frac{E^2 V}{\pi^2 c^3 \hbar^3}.$$

Статистический вес *газа электронов* в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками:

$$g_{\text{эл}}(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} V E^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3}.$$

Тепловое излучение

Тепловое излучение — это испускаемое веществом электромагнитное излучение, возбуждаемое не внешними источниками энергии, а возникающее за счет внутренней энергии вещества.

Тепловое излучение называется *равновесным*, если за любой промежуток времени количество излучаемой веществом энергии в среднем равно количеству поглощенной энергии.

Энергетическая светимость (интегральная испускательная способность) M_s тела — это поток энергии, испускаемый участком еди-

ничной площади поверхности излучающего тела по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерadian:

$$M_s = \frac{d\Phi}{dS},$$

где $d\Phi$ — поток энергии, испускаемый по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерadian элементарным участком поверхности тела, площадь которого равна dS .

Единица энергетической светимости — *ватт на квадратный метр* ($\text{Вт}/\text{м}^2$).

Спектральная испускательная способность тела — это поток энергии, испускаемый с единицы площади поверхности тела по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерadian и отнесенный к единичному интервалу частот (длин волн) электромагнитного излучения:

$$E_\omega = \frac{dM_s}{d\omega},$$

где dM_s — поток энергии, испускаемый с единицы площади поверхности излучающего тела по всем направлениям в пределах телесного угла 2π стерadian и приходящийся на интервал частот $(\omega, \omega + d\omega)$ электромагнитного излучения;

$$E_\lambda = \frac{dM_s}{d\lambda},$$

где dM_s — аналогичный поток, приходящийся на интервал длин волн $(\lambda, \lambda + d\lambda)$ электромагнитного излучения.

Связь между E_ω и E_λ :

$$E_\lambda = \frac{2\pi c}{\lambda^2} E_\omega.$$

Единица спектральной испускательной способности E_ω — *ватт-секунда на метр квадратный* ($\text{Вт}\cdot\text{с}/\text{м}^2$), единица спектральной испускательной способности E_λ — *ватт на метр кубический* ($\text{Вт}/\text{м}^3$).

Спектральной поглощательной способностью или *коэффициентом поглощения* a_ω тела называется отношение потока поглощенной энергии к потоку падающей энергии:

$$a_\omega = \frac{d\Phi_{\text{погл}}}{d\Phi_{\text{пад}}},$$

где $d\Phi_{\text{пад}}$ — поток энергии, падающий на элементарную площадку dS поверхности тела и обусловленный электромагнитными волнами с частотами в интервале $(\omega, \omega + d\omega)$; $d\Phi_{\text{погл}}$ — часть потока $d\Phi_{\text{пад}}$, которая поглощается телом. Величина a_ω — безразмерная; $a_\omega \leq 1$.

Абсолютно черное тело — тело, полностью поглощающее падающее на него электромагнитное излучение; спектральная поглощательная способность абсолютно черного тела равна единице при любой температуре для всех частот ω , $a_\omega \equiv 1$.

Закон Кирхгофа. Отношение спектральной испускательной и спектральной поглотительной способностей не зависит от природы тела и является универсальной (одинаковой для всех тел) функцией частоты и температуры:

$$\frac{E_{\omega}}{a_{\omega}} = f(\omega, T).$$

Следствие 1. Функция $f(\omega, T)$ представляет собой спектральную испускательную способность абсолютно черного тела, температура которого равна T .

Следствие 2. Спектральная испускательная способность E_{ω} произвольного тела равна умноженной на поглотительную способность a_{ω} этого тела спектральной испускательной способности абсолютно черного тела E_{ω}^* : $E_{\omega} = a_{\omega} E_{\omega}^*$.

Плотность энергии теплового излучения u — это энергия излучения всех возможных частот ω (длин волн λ), отнесенная к единице объема заполненной излучением области пространства:

$$u = u(T).$$

Единица плотности энергии — *джоуль на метр кубический* ($\text{Дж}/\text{м}^3$).

Спектральная плотность энергии теплового излучения u_{ω} :

$$u_{\omega} = \frac{du(\omega)}{d\omega},$$

где $du(\omega)$ — часть плотности энергии излучения u , приходящаяся на интервал частот $(\omega, \omega + d\omega)$.

Спектральная плотность энергии теплового излучения u_{λ} определяется аналогично:

$$u_{\lambda} = \frac{du(\lambda)}{d\lambda}, \quad (\text{П.1})$$

где $du(\lambda)$ — часть плотности энергии излучения u , приходящаяся на интервал длин волн $(\lambda, \lambda + d\lambda)$. Единицы измерения u_{ω} — *джоуль-секунда на метр кубический* ($\text{Дж} \cdot \text{с}/\text{м}^3$), u_{λ} — *джоуль на метр в четвертой степени* ($\text{Дж}/\text{м}^4$).

Связь энергетической сходимости абсолютно черного тела M_{ω}^* с плотностью энергии теплового излучения u :

$$M_{\omega}^* = \frac{1}{4}cu_{\omega}.$$

То же для спектральных испускательных способностей E_{ω}^* , E_{λ}^* и спектральных плотностей энергии излучения u_{ω} , u_{λ} :

$$E_{\omega}^* = \frac{1}{4}cu_{\omega},$$

$$E_{\lambda}^* = \frac{1}{4}cu_{\lambda}.$$

Формула Планка (закон излучения Планка):

$$u_{\omega} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar \omega / (\kappa T)} - 1)},$$

или:

$$u_{\lambda} = \frac{16 \pi^2 \hbar c}{\lambda^5 (e^{2 \pi c \hbar / (\lambda \kappa T)} - 1)}.$$

Закон смещения Вина:

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T},$$

где λ_{\max} — длина волны, при которой достигают максимума спектральная плотность излучения u_{λ} и спектральная испускательная способность E_{λ}^* , T — абсолютная температура, b — постоянная ($b = 0,0029$ м·К);

$$\omega_{\max} = 2,8 \frac{\kappa T}{\hbar},$$

где ω_{\max} — частота, при которой достигает максимума спектральная плотность энергии излучения u_{ω} и спектральная испускательная способность E_{ω}^* абсолютно черного тела, κ — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, \hbar — постоянная Планка.

Закон Стефана–Больцмана:

$$u(T) = \sigma' T^4,$$

где σ' — коэффициент пропорциональности, равный $\sigma' = \frac{\pi^2 \kappa^4}{15 c^3 \hbar^3}$;

$$M_{\gamma}^* = \sigma T^4,$$

где σ — коэффициент пропорциональности, равный $\sigma = \frac{\pi^2 \kappa^4}{60 c^2 \hbar^3}$.

Формула Рэлея–Джинса:

$$u_{\omega} = \frac{\kappa T}{\pi^2 c^3} \omega^2$$

при условии $\frac{\hbar \omega}{\kappa T} \ll 1$.

Тепловые свойства кристаллов

Зависимость частоты ω от волнового числа k звуковой волны в модели одномерного кристалла (линейная цепочка одинаковых атомов массы m , расположенных в положении равновесия на расстоянии a друг от друга, γ — коэффициент пропорциональности между упругой силой и смещением атома из положения равновесия):

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|.$$

Уравнение плоской монохроматической звуковой (упругой) волны в одномерном кристалле с периодом решетки a :

$$\xi_k(n, t) = A_k e^{-i(\omega t - kan)},$$

где $\xi_k(n, t)$ — смещение из положения равновесия атома с порядковым номером n (n — любое целое число); ω — циклическая частота; k — волновое число; A_k — амплитуда волны.

Зона Бриллюэна — интервал таких значений волнового числа k , которым соответствуют физически различные звуковые волны. *Первая зона Бриллюэна*:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}.$$

Фононом называется квазичастица, которая ставится в соответствие монохроматической звуковой волне в кристалле. Энергия E и импульс \mathbf{p} фонона связаны с частотой ω и волновым числом \mathbf{k} звуковой волны следующими соотношениями:

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}.$$

В одномерном случае импульс фонона p определен с точностью до величины

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar m}{a},$$

где $m = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$. Величина Δp равна импульсу кристалла при его перемещении как единого целого.

Фонон принадлежит к числу бозонов как частица со спиновым квантовым числом 1 и имеет три возможных проекции спина на заданное направление. Масса покоя фонона равна нулю.

Внутренняя энергия U кристаллической решетки равна сумме полной энергии фононов $U_{\text{фон}}$ и нулевой энергии гармонических осцилляторов U_0 :

$$U = U_0 + U_{\text{фон}} = U_0 + V \frac{3}{2\pi^2} \frac{\kappa^4 T^4}{\hbar^3 s^3} \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

где $x = \hbar\omega/\kappa T$.

Температурой Дебая Θ_D — величина, определяемая условием:

$$\kappa\Theta_D = \hbar\omega_{\max},$$

где ω_{\max} — наибольшая возможная частота звуковых волн в кристалле;

$$\omega_{\max} = (6\pi^2 n)^{1/3} s,$$

где s — скорость звука в кристалле, n — число атомов в единице объема.

Теплоемкость кристаллической решетки при $T \gg \Theta_D$ (закон Дюлонга и Пти):

$$C_{\text{ед.об.реш}} = 3n\kappa,$$

где n — число атомов в единице объема кристалла, κ — постоянная Больцмана.

Теплоемкость кристаллической решетки при $T \ll \Theta_D$:

$$C_{\text{ед.об.реш}} = \frac{2\pi^2}{5} \frac{\kappa^4 T^3}{\hbar^3 s^3},$$

где s — скорость звука в кристалле.

Электроны в кристаллах

Разрешенной зоной называется интервал значений энергии, которой может обладать электрон в кристалле.

Запрещенные зоны — это энергетические промежутки, отделяющие разрешенные зоны друг от друга.

Свойства зон.

1. Число квантовых состояний электронов в разрешенной зоне равно кратности вырождения атомного уровня энергии, из которого возникла зона, умноженному на полное число атомов в кристалле.

2. Число электронов в разрешенной зоне не может превышать числа имеющихся в ней квантовых состояний.

3. В кристалле носителями тока могут служить только те электроны, энергия которых принадлежит а) обобществленной; б) частично заполненной разрешенной зоне. Частично заполненная разрешенная зона называется *зоной проводимости*.

Уравнение Шредингера обобществленного электрона в кристалле:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa^2(x)\psi = 0.$$

Здесь $\kappa^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]$, $U(x)$ — потенциальная энергия электрона, $U(x) = U(x + a)$, где a — период решетки. Решение этого уравнения — *плоская волна Блоха*:

$$\Psi(x, t) = P(x)e^{-i(\omega t - kx)},$$

где $P(x)$ — периодическая функция координат с периодом a .

Волновое число k волны Блоха определено не однозначно, а с точностью до слагаемого $2\pi m/a$, где m — целое. Значения k принято приводить к первой зоне Бриллюэна:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}.$$

Соответственно импульс электрона в кристалле $p = \hbar k$ принято приводить к первой зоне Бриллюэна в пространстве импульсов:

$$-\frac{\hbar\pi}{a} \leq p \leq \frac{\hbar\pi}{a}.$$

Законом дисперсии частицы называется зависимость ее энергии E от импульса p : $E(p)$. *Закон дисперсии волны* — зависимость частоты ω от волнового числа k : $\omega(k)$.

Эффективной массой m^* электрона в кристалле называется величина, определяемая равенством

$$\frac{1}{m^*} = \frac{d^2 E}{dp^2},$$

где $E(p)$ — закон дисперсии электрона.

Удельная электропроводимость кристаллического проводника:

$$\lambda = \frac{ne^2\tau}{m},$$

где n — концентрация электронов проводимости, τ — время свободного пробега, m — эффективная масса, e — заряд электрона.

Электронный газ называется *полностью вырожденным*, если все квантовые состояния с энергией, меньшей энергии Ферми, заняты, а все квантовые состояния с энергией, превышающей энергию Ферми, свободны.

Электронный газ называется *вырожденным*, если ширина κT переходной области от полностью занятых уровней энергии к свободным много меньше энергии Ферми E_F : $\kappa T \ll E_F$.

Энергия Ферми равна:

$$E_F = \frac{(3\pi^2 \hbar^3 n)^{2/3}}{2m},$$

где n — концентрация электронов зоны проводимости, m — масса электрона. Энергия Ферми E_F служит границей между заполненными и свободными уровнями энергии вырожденного электронного газа.

Поверхностью Ферми называется изоэнергетическая поверхность в пространстве волновых чисел или импульсов, соответствующая энергии Ферми.

Теплоемкость единицы объема электронного газа (оценочная величина) равна:

$$C_{\text{эл}} = \frac{9}{2} n \kappa \frac{\kappa T}{E_F}.$$

Полупроводники

Полупроводниками называются кристаллические вещества, которые при низких температурах являются изоляторами, а при нормальных температурах — проводят электрический ток.

Полупроводники делятся на два класса — *чистые* или *собственные* и *примесные*.

Носителями тока в собственных полупроводниках служат электроны в зоне проводимости и *дырки* (незаполненные квантовые состояния) в валентной зоне.

В примесных полупроводниках n -типа основной тип носителей тока — электроны в зоне проводимости.

В примесных полупроводниках p -типа основной тип носителей тока — дырки в валентной зоне.

Концентрация электронов в зоне проводимости полупроводника:

$$n_n = Q_n e^{-\frac{\xi}{\kappa T}},$$

где

$$Q_n = \frac{2}{h^3} \left(\frac{m_n^* \kappa T}{2\pi} \right)^{3/2},$$

m_n^* — эффективная масса электрона, ξ — расстояние от уровня Ферми до дна зоны проводимости.

Концентрация дырок в валентной зоне:

$$n_p = Q_p e^{-\frac{\eta}{\kappa T}},$$

где

$$Q_p = \frac{2}{h^3} \left(\frac{m_p^* \kappa T}{2\pi} \right)^{3/2},$$

m_p^* — эффективная масса дырки, η — расстояние от уровня Ферми до потолка валентной зоны.

Уровень Ферми в чистых полупроводниках расположен посередине запрещенной зоны, в примесных полупроводниках n -типа — вблизи дна зоны проводимости, в примесных полупроводниках p -типа — вблизи потолка валентной зоны.

Концентрация электронов и дырок в собственном полупроводнике:

$$n_n = n_p = n_i = \sqrt{Q_n Q_p} e^{-\frac{\Delta}{2\kappa T}},$$

где $\Delta = \xi + \eta$ — ширина щели — запрещенной зоны, расположенной между валентной зоной и зоной проводимости.

Произведение концентраций электронов и дырок в полупроводнике не зависит от количества примесей и равно квадрату концентрации носителей тока в чистом полупроводнике:

$$n_{n \text{ прим}} n_{p \text{ прим}} = n_i^2.$$

Удельная электропроводимость полупроводника:

$$\lambda = \frac{n_n e^2 \tau_n}{m_n^*} + \frac{n_p e^2 \tau_p}{m_p^*} = n_n e u_n + n_p e u_p,$$

где n_n и n_p — концентрации, τ_n и τ_p — время свободного пробега, m_n^* и m_p^* — эффективные массы, u_n и u_p — подвижности электронов и дырок соответственно.

Наименьшей удельной электропроводимостью обладают чистые полупроводники.

n - p -переходом называется область контакта двух примесных полупроводников, один из которых относится к n -типу, другой — к p -типу.

В области контакта образуется *двойной электрический слой* и возникает *контактная разность потенциалов*. В состоянии равновесия энергия Ферми по обе стороны *n-p*-перехода одинакова.

Полупроводниковый диод представляет собой электротехническое устройство, изготовленное на основе *n-p*-перехода. Вольт-амперная характеристика диода:

$$I = I_0 \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right),$$

где I — сила тока через диод, I_0 — постоянный коэффициент, зависящий от свойств кристалла, U — внешняя ЭДС.

Лазеры

Вынужденное и вынуждающее излучения когерентны.

Вероятность $W_{12}^{\text{ед}}$ перехода атома в единицу времени с уровня 1 на более высокий уровень 2, отнесенная на один квант, равна вероятности $W_{21}^{\text{вын.ед}}$ вынужденного обратного перехода атома в единицу времени, отнесенной на один квант, а также вероятности $W_{21}^{\text{сп}}$ спонтанного обратного перехода атома в единицу времени:

$$W_{12}^{\text{ед}} = W_{21}^{\text{вын.ед}} = W_{21}^{\text{сп}}.$$

Отношение вероятностей вынужденного $W_{21}^{\text{вын}}$ и спонтанного $W_{21}^{\text{сп}}$ перехода атома за единицу времени из состояния 2 в состояние 1 равно числу имеющихся резонансных квантов n :

$$\frac{W_{21}^{\text{вын}}}{W_{21}^{\text{сп}}} = n.$$

Отношение вероятностей вынужденного излучения $W_{21\text{сп}}^{\text{вын}}$ и поглощения $W_{12\text{сп}}$ света активной средой (системой атомов) равно отношению населенностей энергетических уровней 2 и 1:

$$\frac{W_{21\text{сп}}^{\text{вын}}}{W_{12\text{сп}}} = \frac{n_2}{n_1}.$$

Коэффициенты Эйнштейна. Коэффициент Эйнштейна для поглощения

$$B_{12} = W_{12}^{\text{ед}} \frac{\pi c^3}{2\hbar\omega^3};$$

коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения

$$A_{21} = W_{21}^{\text{сп}};$$

коэффициент Эйнштейна для вынужденного излучения

$$B_{21} = W_{21}^{\text{вын.ед}} \frac{\pi c^3}{2\hbar\omega^3}.$$

Пусть u_ω — спектральная плотность равновесного теплового излучения на резонансной частоте ω — частоте перехода атома из состояния

1 в состояние 2; n — число имеющихся в составе этого излучения резонансных квантов, $n = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} u_\omega$. Имеют место равенства:

$$\begin{aligned} W_{12}^{\text{ед}} n &= B_{12} u_\omega, \\ W_{21}^{\text{сп}} &= A_{21}, \\ W_{21}^{\text{вын.ед}} n &= B_{21} u_\omega, \end{aligned}$$

которые подразумевают следующее: 1) вероятность перехода атома в возбужденное состояние в присутствии n квантов, равная $W_{12}^{\text{ед}} n$, пропорциональна спектральной плотности излучения u_ω , B_{12} — коэффициент пропорциональности; 2) коэффициент Эйнштейна A_{21} совпадает с вероятностью спонтанного перехода атома из возбужденного состояния в основное; 3) вероятность вынужденного перехода атома из возбужденного состояния в основное в присутствии n квантов, равная $W_{21}^{\text{вын.ед}} n$, пропорциональна спектральной плотности излучения u_ω , B_{21} — коэффициент пропорциональности.

Связь между коэффициентами Эйнштейна:

$$\begin{aligned} B_{12} &= B_{21}; \\ A_{21} &= \frac{2\hbar\omega^3}{\pi c^3} B_{21}. \end{aligned}$$

При распространении световой волны в среде (вдоль оси x) закон изменения плотности потока световых квантов $j(x)$:

$$j(x) = j_0 e^{\alpha x},$$

где j_0 — плотность потока в плоскости $x = 0$; $\alpha = \sigma(n_2 - n_1)$ — произведение сечения перехода σ между энергетическими уровнями 1 и 2 и разности населенностей n_2 и n_1 уровней.

В равновесной среде $n_2 < n_1$, $\alpha = \sigma(n_2 - n_1) < 0$, и интенсивность света по мере его прохождения через вещество уменьшается. Модуль α в этом случае называется *экстинкцией* вещества, а зависимость $j(x) = j_0 e^{\alpha x}$ — *законом Бугера*.

В неравновесных средах населенность n_2 вышележащего энергетического уровня превосходит населенность n_1 нижележащего уровня (*инверсная населенность*): $n_2 > n_1$, $\alpha = \sigma(n_2 - n_1) > 0$, интенсивность света по мере его прохождения через вещество экспоненциально возрастает. В этом случае величина α называется *коэффициентом усиления среды*.

II. Фундаментальные физические константы

Наименование	Обозначение, формула	Значение в СИ	Значение в СГС
Атомная единица массы	$1 \text{ а.е.м.} = 10^{-3} \text{ кг}/(N_A \cdot \text{моль})$	$1,66057 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$	$1,66057 \cdot 10^{-24} \text{ г}$
Заряд элементарный	e	$1,60219 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$	$4,80324 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЭ}_q$
Комптоновская длина волны нейтрона	$\lambda_{K,n} = 2\pi\hbar/m_n c$	$1,31959 \cdot 10^{-15} \text{ м}$	$1,31959 \cdot 10^{-13} \text{ м}$
Комптоновская длина волны протона	$\lambda_{K,p} = 2\pi\hbar/m_p c$	$1,32141 \cdot 10^{-15} \text{ м}$	$1,32141 \cdot 10^{-13} \text{ см}$
Комптоновская длина волны электрона	$\lambda_{K,e} = 2\pi\hbar/m_e c$	$2,42631 \cdot 10^{-12} \text{ м}$	$2,42631 \cdot 10^{-10} \text{ см}$
Магнетон Бора	$\mu_B = e\hbar/2m_e c$	$9,27408 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл}$	$9,27408 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/Гс}$
Масса покоя нейтрона	m_n	$1,67495 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$	$1,67495 \cdot 10^{-24} \text{ г}$
Энергия покоя нейтрона	$m_n c^2$	$939,573 \text{ МэВ}$	
Масса покоя протона	m_p	$1,67265 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$	$1,67265 \cdot 10^{-24} \text{ г}$
Энергия покоя протона	$m_p c^2$	$938,279 \text{ МэВ}$	
Масса покоя электрона	m_e	$0,91095 \cdot 10^{-30} \text{ кг}$	$0,91095 \cdot 10^{-27} \text{ г}$
Энергия покоя электрона	$m_e c^2$	$0,511003 \text{ МэВ}$	
Постоянная Авогадро	N_A	$6,02204 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$	
Постоянная Больцмана	k	$1,38066 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$	$1,38066 \cdot 10^{-16} \text{ эрг/К}$
Постоянная газовая универсальная	R	$8,31441 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$	$8,31441 \cdot 10^7 \text{ эрг}/\text{моль} \cdot \text{К}$
Постоянная гравитационная	γ	$6,6720 \cdot 10^{-11} \text{ Н} \cdot \text{м}^2/\text{кг}^2$	$6,6720 \cdot 10^{-8} \text{ дин} \cdot \text{см}^2/\text{г}^2$
Постоянная магнитная	μ_0	$1,25664 \cdot 10^{-6} \text{ Гн/м}$	
Постоянная электрическая	$\varepsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2)$	$0,88542 \cdot 10^{-11} \text{ Ф/м}$	

Наименование	Обозначение	Значение в СИ	Значение в СГС
Постоянная Планка	\hbar	$1,05459 \cdot 10^{-34}$ Дж·с	$1,05459 \cdot 10^{-27}$ эрг·с
Постоянная Ридберга	$R = k^2 m_e e^4 / 2 \hbar^3$, где $k = 1/(4\pi\epsilon_0)$, $R = \mu_0^2 m_e c^4 e^4 / 32 \pi^2 \hbar^3$; $R' = R/(2\pi c)$	$R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ $R' = 1,09737 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$	$R' = 1,09737 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$
Постоянная Стефана–Больцмана	$\sigma = \pi^2 \varkappa^4 / (60 \hbar^3 c^2)$	$5,67032 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м ² ·К ⁴)	$5,67032 \cdot 10^{-5}$ эрг/(с·см ² ·К ⁴)
Постоянная закона смещения Вина	b	0,0029 м·К	0,29 см·К
Постоянная тонкой структуры	$\alpha_{\text{СИ}} = \mu_0 c e^2 / (4\pi \hbar)$ ($\alpha_{\text{СГС}} = e^2 / (\hbar c)$)	1/137,036	1/137,036
Скорость света в вакууме	c	$2,99792 \cdot 10^8$ м/с	$2,99792 \cdot 10^{10}$ см/с
Постоянная Фарадея	$F = N_A e$	$0,96485 \cdot 10^5$ Кл/моль	
Первый борковский радиус	$a_0 = \alpha / (4\pi R')$	$0,52918 \cdot 10^{-10}$ м	$0,52918 \cdot 10^{-8}$ см
Радиус электрона классический	$r_e = \mu_0 e^2 / (4\pi m_e)$	$2,81794 \cdot 10^{-15}$ м	$2,81794 \cdot 10^{-13}$ см

III. Плотности некоторых веществ

Вещество	Плотность, г/см ³	Вещество	Плотность, г/см ³
Бор	2,45	Ртуть	13,6
Вода	1,00	Селен	4,5
Воздух (норм. усл.)	$1,293 \cdot 10^{-3}$	Сера	2,1
Германий	5,46	Стронций	2,54
Графит	1,60	Теллур	6,02
Индий	7,28	Торий	11,7
Кадмий	8,65	Тяжелая вода D ₂ O	1,10
Кремний	2,35	Уран	19,0
Окись бериллия BeO	3,03	Фосфор	1,83
Парафин CH ₂	0,89	NaCl	2,18
Плутоний	19,8	CsCl	4,04

**IV. Периодическая таблица элементов
Д. И. Менделеева**

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Абсолютно черное тело 125

Акцепторная примесь 186

Атомный номер 71

База транзистора 201

Бозоны 100, 108

Боровские орбиты 70

Возбужденное состояние 76

Волна Блоха 169

— де Бройля 32, 33

Волновая функция 33

Вольт-амперная характеристика 199

Время жизни возбужденных состояний атомов 76

Вырожденные состояния 228

Вырожденный газ 178

— — электронный 178

Гармонический осциллятор 65

Генерация лазерного излучения 214

— — — импульсная 215

— — — непрерывная 215

Гипотеза де Бройля 32

Гиромагнитное отношение 94

Главное квантовое число 73, 227

Головная линия спектральной серии 77

Граница спектральной серии 77

Двойной электрический слой 196

Дисперсия случайной величины 51

Донорная примесь 186

Дублет 99

Дырки 175, 186

Закон дисперсии, акустическая ветвь 146

— —, оптическая ветвь 146

— Бугера 212

— T^3 Дебая 155

Закон дисперсии 143

— — волны 171

— — частицы 171

— Дюлонга и Пти 154

— излучения Планка 130

— Кирхгофа 126

— смещения Вина 132

— Стефана-Больцмана 134

Зона Бриллюэна 143, 148

— валентная 185

— запрещенная 159

— проводимости 161

— разрешенная 159

Зоны энергетические 159

Излучение вынужденное 204

— индуцированное 204

— спонтанное 204

Инверсная населенность 209

Ионизационный потенциал 76

Испускательная способность интегральная 123

— — спектральная 124

Квазиимпульс 148

Квазичастица 147

Квант электромагнитного излучения 26

Квантовое состояние 75

— число 59

— — внутреннее 90

— — главное 73, 87, 227

— — орбитальное 74, 87

— — магнитное 74, 87

— — радиальное 87

— — спиновое 75, 228

Коллектор транзистора 201

Комптоновская длина волны 30

Контактная разность потенциалов 196

- Конфигурация атома электронная 105
Концентрация электронов и дырок 189, 194
Корпускулярно-волновой дуализм 31
Коэффициент поглощения 125
— усиления среды 213
— Эйнштейна для вынужденного излучения 210
— — — поглощения 210
— — — спонтанного излучения 210
Коэффициенты Эйнштейна 209
Красная граница фотоэффекта 25
Кратность вырождения 75, 89, 228
Кристаллы ионные 139
— ковалентные 139
— молекулярные 139
— с металлической связью 139
- Лазер** 213
— на рубине 215
— полупроводниковый инжекционный 217
Лорентца преобразования 16
Лорентцево сокращение 13, 14
- Магнетон Бора** 93, 228
Магнитный момент электрона орбитальный 92
— — — собственный 93
— — — спиновый 93
Метастабильные состояния атома 76, 216
Мультиплетность состояния 99
— уровня 91
- Нормальные колебания** 137
Нормировка волновой функции 38
Носители тока 194
Нулевая энергия гармонического осциллятора 66
- Оболочка электронная** 101
Оператор 43
— кинетической энергии 46
—, координаты 44
— полной механической энергии 47
— потенциальной энергии 46
— проекции импульса 45
- Оператор проекции момента импульса 49
— физической величины 44
Оптический квантовый генератор 213
Опыт Дэвиссона и Джермера 31
— Майкельсона 10
— Штерна и Герлаха 88
- Переходы вынужденные** 204
— индуцированные 204
— спонтанные 204
Период кристаллической решетки 138
Периодическая система элементов 100
Плотность вероятности 49
— энергии теплового излучения 127
— — —, спектральная 128
Поверхность Ферми 180
Поглощательная способность, спектральная 125
Подвижность 176
Полупроводники 185
— примесные 185
— собственные 185
— чистые 185
Полупроводниковый диод 199
Постоянная Планка 26
— Ридберга 78
— Стефана–Больцмана 134
Постулат Планка 26
Постулаты Бора 69
— Эйнштейна 11
Потенциал запирающий 23
— ионизационный 76
Правила отбора 67, 105
— Хунда 103
Преобразования Лорентца 16
Принцип неопределенности 36
— Паули 100
Пробой изолятора 185
Проницаемость потенциального барьера 64, 227
Пси-функция 33
- Работа выхода** 26, 224
Радиусы боровских орбит 70
Распределение Бозе–Эйнштейна 111

- Распределение Больцмана 114
 — Максвелла 49, 50
 — Ферми–Дирака 113
- Связь jj** 100
 — нормальная, электронов в атоме 99
 — Рассела–Саундерса 99
 Серое тело 126
 Сечение вынужденного перехода 212
 Синглет 99
 Скорость групповая звуковых волн в кристалле 145
 — дрейфа электронов 176
 — фазовая звуковых волн в кристалле 144
 Сложение угловых моментов 89
 Слой электронный 101
 Случайная величина 49
 Смещение комптоновское 28
 Собственная функция 52
 Собственное значение 53
 — состояние 53
 Соотношение неопределенностей 36
 Спектр атома 77
 Спектральная испускательная способность 124
 — линия 77
 — поглощательная способность 125
 Спектральные серии атома водорода 77
 Спин фонона 150
 — электрона 75, 89
 Спин-орбитальное взаимодействие 96
 Среднее значение 44
 Статистический вес 109, 116
 Стационарное состояние 54
- Температура Дебая** 152
 Тепловое излучение 122
 — — равновесное 122
 Теплоемкость вырожденного электронного газа 182
 Терм 100
 Ток через n - p -переход диффузионный 200
 — — — дрейфовый 200
- Ток через n - p -переход насыщения 201
 — — — обратный 201
 — — — прямой 201
 Тонкая структура уровней энергии 97
 Транзистор 201
 Триплет 99
 Туннельный эффект 64, 227
- Угловой момент атома орбитальный** 98
 — — — полный 98
 — — — спиновый 98
 — — — частицы 83
 — — электрона орбитальный 74, 87
 Угловой момент электрона полный 90
 — — — собственный 75, 89
 — — — спиновый 75, 89
 Узлы кристаллической решетки 139
 Ультрафиолетовая катастрофа 135
 Уравнение волны де Бройля 34
 — Шредингера временное 55
 — — стационарное 54
 — Эйнштейна для фотоэффекта 26, 224
 Уровень Ферми в полупроводниках 192, 193
 Условие нормировки 38
- Фактор Ланде** 95, 229
 Фермионы 100, 108
 Фонон 146
 Формула Бальмера 78
 — Комптона 30
 — Планка 131
 — Рэля–Джинса 134
 Фотон 26
 Фотоэффект 22
 — внешний 22
 — внутренний 22
 Функция распределения 49
- Химический потенциал** 111
- Ширина спектральных линий** 78
 — энергетического уровня 79
 — щели полупроводника 185

- Экстинкция 212
- Электронная конфигурация атома 105
 - оболочка атома 101
- Электронный слой 101
- Электроны обобществленные 164
 - проводимости 164
 - сильно связанные с атомом 163
- Электропроводимость удельная полупроводника 194
 - — проводника 176
- Элементарный фазовый объем 119
- Эмиттер транзистора 201
- Энергетическая светимость 123
- Энергетические зоны кристалла 159
- Энергия гармонического осциллятора 66
 - — — нулевая 66
- Энергия связи кристалла 139
 - Ферми 113, 179
- Эффект Комптона 28
- Эффективная масса электрона 173