

## Лекции 1 - 2. Квантовые свойства излучения.

*Гипотеза Планка, дискретный характер испускания и поглощения электромагнитного излучения веществом. Квантовое объяснение законов теплового излучения. Корпускулярно-волновой дуализм света. Фотоны. Фотозффект и эффект Комптона.*

Тела испускают электромагнитные волны за счет различных видов энергии. Излучение, испускаемое за счёт внутренней энергии тел, называется *тепловым излучением*.

Остальные типы излучения называются люминесценция. *Люминесценция* — нетепловое свечение вещества, происходящее после поглощения им энергии возбуждения. *Фотолуминесценция* — свечение под действием света (видимого и УФ-диапазона). Она, в свою очередь, делится на флуоресценцию и фосфоресценцию. *Хемилуминесценция* — свечение, использующее энергию химических реакций; *катодолуминесценция* — вызвана облучением быстрыми электронами (катодными лучами); *сонолуминесценция* — люминесценция, вызванная звуком высокой частоты и т.д.

При люминесценции равновесие излучения с телом невозможно, т.к. излучение прекращается после полного израсходования запасённой энергии.

Особенностью теплового излучения является то, что оно существует при любой температуре и может находиться в термодинамическом равновесии с телами, (т.е. когда мощность энергии излучения тела равна мощности поглощаемого излучения). Излучение происходит во всем диапазоне длин волн (от 0 до  $+\infty$ ) или во всём диапазоне частот.

Для характеристики мощности излучения вводят физическую величину – *энергетическая светимость*  $R$ . Это мощность излучения, испускаемого единичной площадкой поверхности тела по всем возможным направлениям (т.е. в пределах телесного угла  $2\pi$ ). Единицы измерения энергетической светимости – Вт/м<sup>2</sup>.

Спектральной испускательной способностью тела (спектральной плотностью энергетической светимости) называется физическая величина, равная отношению мощности излучения  $dR_\omega$  для волн с частотами в диапазоне  $(\omega, \omega + d\omega)$  к величине этого диапазона  $r_\omega = \frac{dR_\omega}{d\omega}$  (единицы измерения  $\frac{\text{Вт} \cdot \text{с}}{\text{м}^2} = \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}$ ). Следовательно, если известна функция спектральной испускатель-

ной способности, то можно получить энергетическую светимость  $R = \int_0^\infty r_\omega d\omega$ . Поэтому энергетическую светимость называют также *интегральной испускательной способностью*.

Т.к. тепловое излучение осуществляется за счёт внутренней энергии, то мощность излучения зависит от температуры тела, поэтому спектральная светимость является функцией двух параметров – частоты и температуры, что подчёркивают соответствующими обозначениями

$$r_{\omega,T} = r(\omega, T) \text{ и } R_T = \int_0^\infty r_{\omega,T} d\omega.$$

*Замечание.* Спектральную светимость можно определить и через длину волны излучения

$\tilde{r}_{\lambda,T} = \tilde{r}(\lambda, T)$ . Так как  $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ , то  $d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda$  ( $c$  – величина скорости света). Поэтому с учетом того, что при  $\lambda \rightarrow +0$  выполняется  $\omega \rightarrow +\infty$  получаем равенство

$$R_T = \int_0^{+\infty} r_{\omega,T} d\omega = - \int_{+\infty}^0 r_{\omega,T} \frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda = \int_0^{+\infty} r_{\omega,T} \frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda = \int_0^{+\infty} \tilde{r}_{\lambda,T} d\lambda, \text{ т.е. } r_{\omega,T} = \tilde{r}_{\lambda,T} \frac{\lambda^2}{2\pi c}.$$

В общем случае, часть падающего на тело излучения отражается, а часть поглощается (излучение, проходящее сквозь тело, можно не рассматривать). Физическая величина, равная отношению мощности поглощенного излучения для волн с частотами в диапазоне  $(\omega, \omega + d\omega)$  к величине мощности падающего излучения в том же диапазоне частот, называется спектральной

поглощательной способностью тела и также является функцией частоты и температуры

$$a_{\omega,T} = a(\omega, T) = \frac{d\Phi_{\omega}^{\text{ПОГЛОЩ}}}{d\Phi_{\omega}^{\text{ПАДАЮЩ}}}.$$

*Определение.* Тело, поглощающее полностью падающее на его поверхность излучение во всем диапазоне частот и температур, называется *абсолютно чёрным телом* (АЧТ). Для АЧТ поглощательная спектральная способность тождественно равна единице для всего диапазона частот (и температур)

$$a^{АЧТ}_{\omega,T} = a^{АЧТ}(\omega, T) \equiv 1.$$

Тела, для которых  $a_{\omega,T} < 1$  (независимо от  $\omega$  и  $T$ ) называют *серыми*.

Закон Кирхгофа.

Рассмотрим тело, находящееся в равновесии со своим тепловым излучением. В силу принципа *детального равновесия*, для каждого интервала частот  $(\omega, \omega + d\omega)$  выполняется равенство

$$d\Phi_{\omega}^{\text{ПОГЛОЩ}} = dR_{\omega}$$

выражающее тот факт, что внутренняя энергия тела не меняется, поэтому доля поглощенной энергии равна доле излученной энергии для каждого интервала частот  $(\omega, \omega + d\omega)$ . Но, с учётом определения спектральной поглощательной способности и спектральной испускательной способности, это равенство можно переписать в виде

$$a_{\omega,T} \cdot d\Phi_{\omega}^{\text{ПАДАЮЩ}} = r_{\omega,T} \cdot d\omega$$

откуда следует соотношение  $\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} = \frac{d\Phi_{\omega}^{\text{ПАДАЮЩ}}}{d\omega}$ .

В этом равенстве справа стоит спектральная энергетическая характеристика падающего излучения, которая не зависит от свойств тела.

Если рассмотреть замкнутую равновесную термодинамическую систему из  $N$  разных тел (в том числе и АЧТ), то можно написать равенство

$$\left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_2 = \dots = \left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_N = \frac{d\Phi_{\omega}^{\text{ПАДАЮЩ}}}{d\omega}.$$

Т.к. одно из тел является абсолютно чёрным телом, для которого  $a^{АЧТ}_{\omega,T} = a^{АЧТ}(\omega, T) \equiv 1$ , то

$\left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_i = r^{АЧТ}_{\omega,T}$  для любого номера  $i=1, \dots, N$ . Т.о. *отношение спектральной испускательной способности к спектральной поглощательной способности не зависит от свойств тела и является функцией частоты и температуры, совпадающей со спектральной плотностью энергетической светимости АЧТ.* Это утверждение носит название закона Кирхгофа.

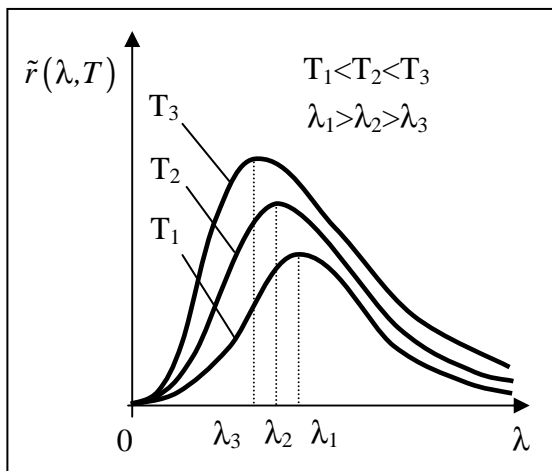
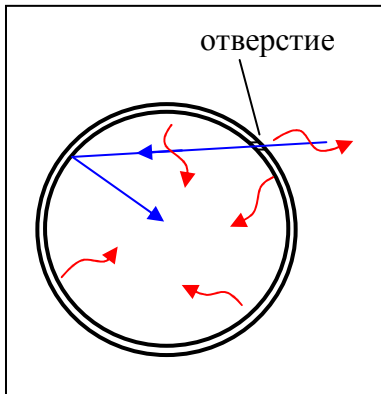
Равновесное состояние излучения с веществом можно характеризовать объемной плотностью энергии  $u_T$  равновесного излучения. Соответственно, можно ввести спектральную

плотность энергии  $u_{\omega,T}$  такую, что  $u_T = \int_0^{+\infty} u_{\omega,T} d\omega$  (индекс  $T$  подчёркивает зависимость от температуры.)

Расчёты показывают, что для АЧТ энергетическая светимость связана с объёмной плотностью энергии соотношением  $R = \frac{c}{4} u_T$ , и для спектральных функций  $r^{АЧТ}_{\omega,T} = \frac{c}{4} u_{\omega,T}$ .

### Модель АЧТ.

Абсолютно чёрное тело является *идеализацией*. В природе АЧТ не существует. Однако достаточной хорошей моделью является практически замкнутая колба с двойными стенками (между которыми - вакуум). В стенке этой колбы имеется малое отверстие. Излучение, вошедшее в отверстие, испытывает многократное отражение от стенок полости и, в конце концов, практически полностью ими поглощается. Т.к. площадь отверстия мала, то вероятность того, что падающее излучение после многократного отражения выйдет из полости, практически равна нулю. Температура стенок полости поддерживается постоянной. Поэтому внутренние стенки полости находятся в термодинамическом равновесии со своим тепловым излучением. Часть этого излучения выйдет через отверстие, и его можно зарегистрировать. Моделью АЧТ является именно *отверстие*, т.к. из него выходит излучение, близкое к излучению АЧТ.



Экспериментальные данные свидетельствуют о том, спектральная плотность энергетической светимости как функция частоты (или длины волны) имеет глобальный максимум. Соответствующая этому максимуму длина волны уменьшается с ростом температуры АЧТ, или, как принято говорить, *смещается* в сторону коротких длин волн.

На основе экспериментального исследования теплового излучения Стефан и Больцман получили зависимость энергетической светимости АЧТ от температуры. По определению, интегральная светимость равна площади под графиком спектральной светимости  $R_T = \int_0^{+\infty} r_{\omega,T} d\omega$ .

**Закон Стефана-Больцмана** гласит, что энергетическая светимость АЧТ прямо пропорциональна 4-й степени температуры

$$R^{AЧТ} = \sigma \cdot T^4.$$

(Этот закон следует из законов термодинамики.) Коэффициент пропорциональности  $\sigma$  носит название постоянной Стефана-Больцмана и численно равен  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}^4}$ .

Вильгельм Вин рассмотрел модель АЧТ, в которой одна из стенок полости могла двигаться с некоторой скоростью. Тогда из условия термодинамического равновесия излучения с веществом, учитывая эффект Доплера, он показал, что общий вид спектральной плотности энергетической светимости АЧТ как функции частоты и температуры следующий

$$r^{AЧТ}(\omega, T) = \omega^3 \cdot F\left(\frac{\omega}{T}\right),$$

где  $F\left(\frac{\omega}{T}\right)$  - некоторая функция от отношения  $\frac{\omega}{T}$ . Соответственно,  $r_{\omega,T} = \tilde{r}_{\lambda,T} \frac{\lambda^2}{2\pi c}$ , откуда

$$\tilde{r}_{\lambda,T}^{AЧТ} = r_{\omega,T}^{AЧТ} \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \omega^3 \cdot F\left(\frac{\omega}{T}\right) \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3 \cdot F\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right) \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \tilde{F}\left(\frac{1}{\lambda T}\right) \frac{1}{\lambda^5}.$$

При этом функция  $\tilde{r}_{\lambda,T}^{AЧТ}$  должна иметь максимум, соответствующий определенной длине волны

$\lambda_{MAX}$ . Условие максимума функции  $\frac{d}{d\lambda}(\tilde{r}_{\lambda,T}^{AЧТ}) = \frac{d}{d\lambda}\left[\tilde{F}\left(\frac{1}{\lambda T}\right) \frac{1}{\lambda^5}\right] = 0$  приводит к соотношению

$$\frac{d}{d\lambda} \left[ \tilde{F} \left( \frac{1}{\lambda T} \right) \frac{1}{\lambda^5} \right] = -\tilde{F}' \left( \frac{1}{\lambda T} \right) \frac{1}{\lambda^2 T} \frac{1}{\lambda^5} - 5\tilde{F} \left( \frac{1}{\lambda T} \right) \frac{1}{\lambda^6} = 0$$

откуда после сокращения  $\lambda^6$  и обозначения  $x = \frac{1}{\lambda T}$  получим уравнение с одной переменной

$$\tilde{F}'(x)x + 5\tilde{F}(x) = 0.$$

Т.к. максимум функции существует, то у этого уравнения есть хоть одно решение, соответствующее глобальному максимуму  $x = x_{MAX}$ . Тогда  $x_{MAX} = \frac{1}{\lambda_{MAX} T}$ . Т.е. длина волны, соответствующая максимуму спектральной плотности светимости обратно пропорциональна температуре АЧТ.

Закон смещения Вина.

Длина волны, соответствующая максимуму спектральной плотности энергетической светимости АЧТ обратно пропорциональна температуре АЧТ:  $\lambda_{MAX} = \frac{b}{T}$ .

Константа  $b = 2,9 \cdot 10^{-3}$  м·К носит название *постоянной Вина*.

Из этого закона следует, что при повышении температуры АЧТ, максимум функции  $r^{AЧТ}(\omega, T)$  (или  $\tilde{r}^{AЧТ}(\lambda, T)$ ) смещается в сторону коротких длин волн. (Отсюда и следует «странное» название – закон смещения.)

### Приложение.

Обоснование закона Стефана-Больцмана с термодинамической точки зрения можно провести следующим образом. Первое начало термодинамики для равновесных процессов  $TdS = dU + pdV$  можно записать через дифференциальное соотношение

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V dT + \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T dV = \frac{1}{T} \left( \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV + pdV \right)$$

Поэтому  $\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$  и  $\left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \frac{1}{T} \left( \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p \right)$ .

Но  $\frac{\partial^2 S}{\partial V \partial T} = \frac{\partial^2 S}{\partial T \partial V}$ , тогда  $\frac{\partial}{\partial V} \left\{ \frac{1}{T} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \right\} = \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{T} \left( \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p \right) \right\}$  или

$$\frac{1}{T} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial T} \right) = -\frac{1}{T^2} \left( \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p \right) + \frac{1}{T} \left( \left( \frac{\partial^2 U}{\partial T \partial V} \right) + \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \right). \text{ Откуда } \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + p = T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V.$$

Вводя давление равновесного излучения как  $p = \frac{1}{3}u$ , где  $u = \frac{U}{V}$  - объёмная плотность

внутренней энергии, получаем равенство  $4u = T \left( \frac{\partial u}{\partial T} \right)_V$ . После интегрирования выражения

$$4 \frac{dT}{T} = \frac{du}{u} \text{ получаем, что объёмная плотность внутренней энергии пропорциональна 4-й степе-}$$

пени температуры  $u = c_0 T^4$ , где  $c_0$  – константа интегрирования

Качественное обоснование формулы Вина может быть следующим. По закону Стефана-Больцмана  $R_T^{AЧТ} = \int_0^{+\infty} r_{\omega, T}^{AЧТ} d\omega = \sigma \cdot T^4$ . Если формально при  $T = const$  сделать замену  $\omega = x \cdot T$ , то

это выражение примет вид  $T \int_0^{+\infty} r^{A_{QT}}(x) dx = \sigma \cdot T^4$ . Т.к. зависимость от  $T$  должна быть одинаковой с обеих сторон равенства, то подынтегральная функция должна иметь вид

$$r^{A_{QT}}(x) = T^3 \cdot f(x) \text{ или } r^{A_{QT}}(\omega, T) = \omega^3 \cdot F\left(\frac{\omega}{T}\right), \text{ где введено обозначение } F(x) = \frac{f(x)}{x^3}.$$

#### Формула Рэлея-Джинса

Рэлей и Джинс попытались получить аналитическую зависимость спектральной светимости от частоты. Для этого они привлекли методы классической термодинамики. Т.к. в плоской электромагнитной волне энергия поровну распределяется между магнитным и электрическим полями, то можно считать, что каждой волне соответствует две степени свободы  $i=2$ , поэтому средняя тепловая энергия переносимая электромагнитной волной равна

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon_{\mathcal{E}} \rangle + \langle \varepsilon_M \rangle = \frac{kT}{2} + \frac{kT}{2} = kT.$$

Подсчёт спектральной плотности количества волн (отношение возможного количества стоячих волн с частотами в интервале  $(\omega, \omega + d\omega)$  в некотором объёме к величине этого объёма) приводит к величине

$$\frac{dN_{\omega}}{dV} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}.$$

Следовательно, спектральная объёмная плотность энергии будут

$$\text{равна } u_{\omega, T} = \frac{dN_{\omega}}{dV} \langle \varepsilon \rangle = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT. \text{ Откуда } r^{A_{QT}}_{\omega, T} = \frac{c}{4} u_{\omega, T} = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT.$$

Оказалось, что формула Рэлея-Джинса удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными только в области больших длин волн (т.е. малых частот.) При этом с ростом частоты объёмная плотность энергии неограниченно возрастает. Т.к. эта формула была получена с учётом классических представлений, но результат не согласуется с результатами эксперимента, то стало ясно, что классическое представление является неудовлетворительным. Такую ситуацию условно назвали «ультрафиолетовой катастрофой».

Для объяснения поведения функции Макс Планк в 1900 году предложил гипотезу о *квантах*. Согласно этой гипотезе энергия системы может принимать только дискретные значения. При испускании электромагнитных волн энергия системы уменьшается на величину энергии излучения. Поэтому энергия излучения тоже является дискретной. Минимальную величину энергии излучения он назвал *квантом*. Квант энергии  $E = h\nu = \hbar\omega$  пропорционален величине излучения.

Коэффициент пропорциональности  $h \approx 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с называется *постоянной Планка*.

Соответственно, *приведённая постоянная Планка*  $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,055 \cdot 10^{-34}$  Дж·с.

Постоянная Планка является принципиально новой константой и не может быть получена из констант классической физики.

Если рассмотреть равновесное излучение как термодинамическую систему, то к ней можно применить классическое распределение Больцмана. Вероятность нахождения системы в одном из состояний со значением энергии  $E_n$  определяется выражением

$$p_n = \frac{\exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)}$$

здесь суммирование проводится по полному набору дискретных значений  $\{E_0, E_1, E_2, \dots, E_N\}$ .

Среднее значение энергии определится выражением

$$\langle \varepsilon \rangle = p_0 E_0 + p_1 E_1 + p_2 E_2 + \dots + p_N E_N = \sum_{i=0}^N p_i E_i.$$

Для электромагнитной волны теплового излучения характерно излучение во всём диапазоне частот, поэтому набор энергий будет бесконечным  $\{0, \hbar\omega, 2\hbar\omega, \dots, n\hbar\omega, \dots\}$ . Тогда

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} p_i E_i = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) E_i}{\sum_{i=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) E_n}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right) n\hbar\omega}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right)}.$$

Здесь для удобства немой индекс суммирования  $i$  заменён на  $n$ . Учтем, что в бесконечной геометрической прогрессии

$$1, \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right), \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right), \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{kT}\right), \dots$$

знаменатель прогрессии равен  $\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)$ . Если предположить, что  $\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) < 1$ , то сумма равна  $\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right) = 1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + \dots = \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}$ .

Тогда среднее значение энергии

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right) n\hbar\omega}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right)} = \frac{\hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + 2\hbar\omega \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + 3\hbar\omega \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{kT}\right) + \dots}{1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{kT}\right) + \dots} = \\ &= \left( \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + 2\hbar\omega \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + 3\hbar\omega \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{kT}\right) + \dots \right) \cdot \left( 1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right) = \\ &= \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - \hbar\omega \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + 2\hbar\omega \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) - 2\hbar\omega \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{kT}\right) + 3\hbar\omega \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{kT}\right) - \dots = \\ &= \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + \hbar\omega \exp\left(-\frac{2\hbar\omega}{kT}\right) + \hbar\omega \exp\left(-\frac{3\hbar\omega}{kT}\right) + \dots = \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \left( 1 + \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) + \dots \right) = \\ &= \hbar\omega \frac{\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)} = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}, \text{ т.е. } \langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \end{aligned}$$

Следовательно, спектральная объемная плотность энергии будут равна

$$u_{\omega,T} = \frac{dN_{\omega}}{dV} \langle \varepsilon \rangle = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}. \text{ Откуда } r^{AQT}_{\omega,T} = \frac{c}{4} u_{\omega,T} = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Закон излучения Планка.

$$\text{Спектральная энергетическая светимость АЧТ равна } r^{AQT}_{\omega,T} = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Следствия из формулы излучения Планка.

1) Вид функции в законе Планка совпадает с формулой Вина  $r^{AQT}(\omega, T) = \omega^3 \cdot F\left(\frac{\omega}{T}\right)$ .

2) Найдем длину волны, соответствующую максимуму спектральной светимости АЧТ.

$$\text{Т.к. } \tilde{r}_{\lambda,T}^{AQT} = r_{\omega,T}^{AQT} \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar \omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3}{\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right) - 1} \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 c^2 \hbar}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right) - 1\right)},$$

$$\text{то } \frac{d}{d\lambda} \left( \tilde{r}_{\omega,T}^{AQT} \right) = \frac{d}{d\lambda} \left\{ \frac{4\pi^2 c^2 \hbar}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right) - 1\right)} \right\} = 0, \text{ откуда}$$

$$\frac{d}{d\lambda} \left\{ \frac{4\pi^2 c^2 \hbar}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right) - 1\right)} \right\} = -5 \frac{4\pi^2 c^2 \hbar}{\lambda^6 \left(\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right) - 1\right)} + \frac{4\pi^2 c^2 \hbar \cdot \exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right)}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right) - 1\right)^2} \frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda^2} = 0,$$

$$\frac{\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}\right) - 1\right)} \frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda} = 5.$$

Вводя обозначение  $x = \frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{\lambda}$ , получаем трансцендентное уравнение  $x \cdot \exp(x) = 5(\exp(x) - 1)$ .

Решение этого уравнения  $x_0 \approx 4,965114232$ . Откуда для длины волны  $\lambda_{MAX}$ , соответствующей максимуму спектральной испускательной способности получаем выражение

$$\lambda_{MAX} = \frac{\hbar}{kT} \frac{2\pi c}{x_0} \approx \frac{2,9 \cdot 10^{-3}}{T} \text{ м.}$$

Следовательно, вычисленное значение постоянной Вина  $b = 2,9 \cdot 10^{-3}$  м·К практически совпадает с экспериментальным значением.

3) Найдем интегральную светимость

$$R_T = \int_0^{+\infty} r_{\omega,T}^{AQT} d\omega = \int_0^{+\infty} \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar \omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} d\omega = \int_0^{+\infty} \frac{(kT)^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \frac{\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right)^3}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} d\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) = \frac{k^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} T^4 \int_0^{+\infty} \frac{x^3}{\exp(x) - 1} dx$$

Численный расчёт даёт значение  $\int_0^{+\infty} \frac{x^3}{\exp(x) - 1} dx \approx 6,5$ , откуда  $R_T \approx 5,65 \cdot 10^{-8} \cdot T^4$ .

Т.е. вычисленное значение постоянной Стефана-Больцмана практически совпадает с экспериментальным.

4) Если в законе излучения Планка  $r_{\omega,T}^{AQT} = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar \omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1}$  устремить  $\hbar \omega \rightarrow +0$ , то с учетом

$$\text{разложения } \exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) \approx 1 + \frac{\hbar \omega}{kT}, \text{ получим выражение } r_{\omega,T}^{AQT} \approx \frac{1}{4\pi^2 c^2} \frac{\hbar \omega^3}{1 + \frac{\hbar \omega}{kT} - 1} = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT,$$

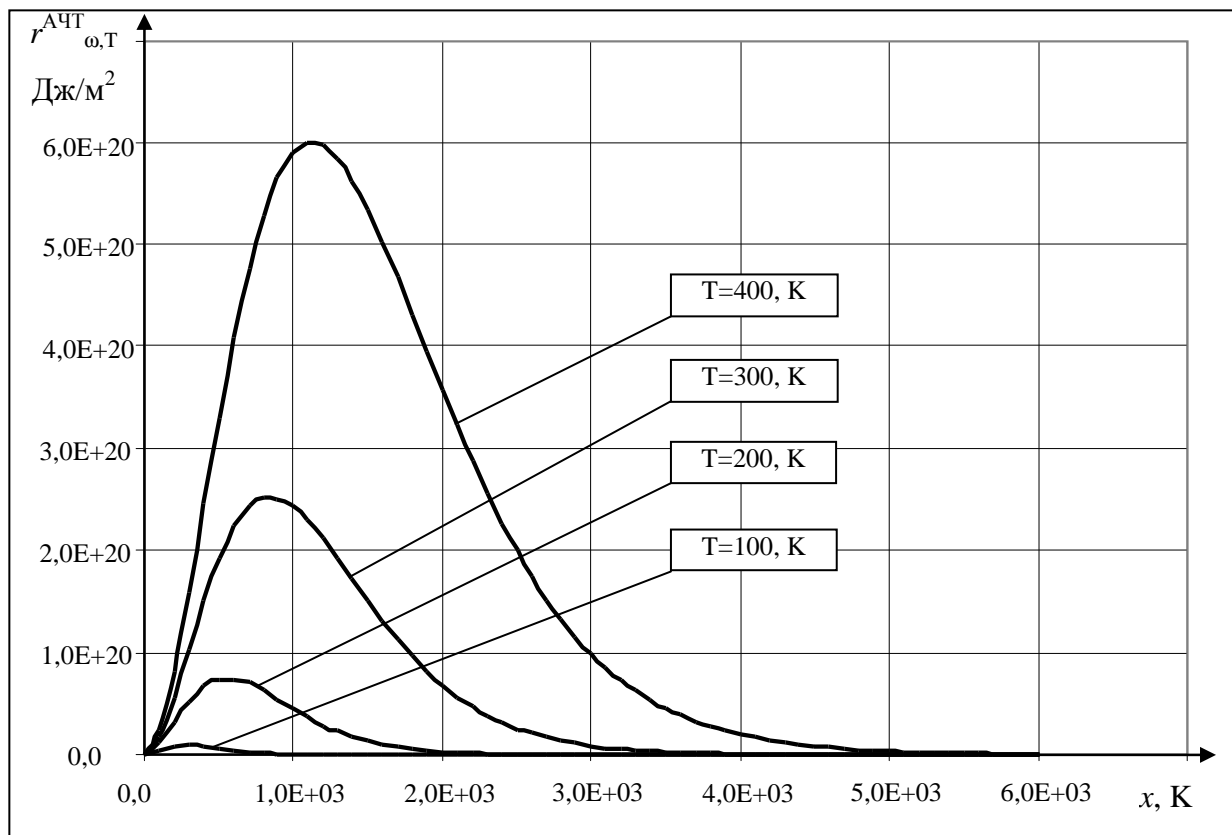
совпадающее с формулой Рэля-Джинса. Т.е. формула Рэля-Джинса описывает случай, когда энергия кванта излучения много меньше энергии теплового движения  $\hbar \omega \ll kT$ .

5) Для примера представим графики  $r^{A\text{ЧТ}}_{\omega,T}$  для некоторых температур. Для этого введём переменную  $x = \frac{\hbar\omega}{k}$  и перепишем закон излучения Планка в виде

$$r^{A\text{ЧТ}}_{\omega,T} = \frac{(k)^3}{4\pi^2 c^2 \hbar^2} \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k}\right)^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} = \frac{k^3}{4\pi^2 c^2 \hbar^2} \frac{x^3}{\exp(x) - 1} = \frac{(1,38 \cdot 10^{-23})^3}{4\pi^2 \cdot 9 \cdot 10^{-16} \cdot 1,055^2 \cdot 10^{-68}} \cdot \frac{x^3}{\exp\left(\frac{x}{T}\right) - 1}$$

Тогда  $r^{A\text{ЧТ}}_{\omega,T} \approx 6,6 \cdot 10^{12} \frac{x^3}{\exp\left(\frac{x}{T}\right) - 1}$ . Графики такой зависимости для различных  $T$  представлены

выше.



### Фотоэффект

*Фотоэлектрическим эффектом* или *внешним фотоэффектом* называется явление испускания электронов металлами под действием падающего света. (Явление испускания электронов веществом под действием падающего света называется фотоэмиссией).

Явление фотоэффекта открыл Герц в 1887 г.

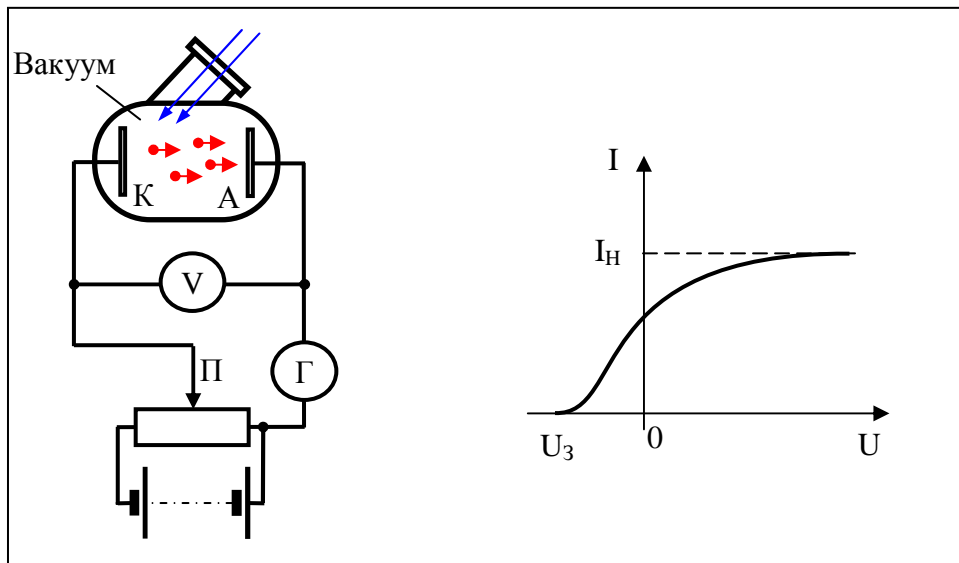
Александр Григорьевич Столетов в конце 19 века установил законы фотоэффекта:

- 1) наибольшее действие оказывают ультрафиолетовые лучи;
- 2) сила тока насыщения возрастает с увеличением освещённости;



3) испускаемые под действием света частицы имеют отрицательный заряд. (Э. А. фон Ленард и Дж. Дж. Томсон затем установили, что это – электроны.)

В установке для исследования фотоэффекта свет сквозь кварцевое стекло освещает ка-



тод, который вместе с анодом находится в вакуумированной колбе. Напряжение между катодом и анодом  $V$  можно регулировать (положительным считается напряжение, при котором потенциал катода меньше потенциала анода). Наличие тока в цепи регистрируют гальванометром Г. Вольт-амперная характеристика фотоэффекта свидетельствует, что

- 1) при освещении катода ток в цепи есть даже при нулевом напряжении между катодом и анодом. Это означает, что часть электронов, вылетевших с катода, попадает на анод.
- 2) Наличие тока освещения говорит о том, что все электроны, вылетевшие с катода, попадают на анод.
- 3) При некотором обратном (задерживающем) напряжении фототок в цепи прекращается. Величина этого напряжения зависит от частоты падающего света, но не зависит от освещённости. Этот факт противоречит классическому описанию – при увеличении освещённости катода напряженность электрического поля увеличивается – поэтому скорость электронов вылетающих должна возрасти, т.е. величина задерживающего напряжения должна зависеть от освещённости.

Формула Эйнштейна для фотоэффекта.

А.Эйнштейн в 1905 г. построил теорию фотоэффекта (за эту работу он получил Нобелевскую премию по физике). Он предположил, что электромагнитное излучение не только испускается квантами, но поглощается тоже квантами. Тогда по закону сохранения энергии

$$\hbar\omega = A_B + E_{\text{кин\_MAX}} \quad \text{или} \quad h\nu = A_B + E_{\text{кин\_MAX}}$$

т.е. энергия поглощённого кванта энергии расходуется на совершение электроном работы по выходу из металла (величина  $A_B$  называется работой выхода из металла) и на сообщение электрону кинетической энергии движения.

Величина работы выхода  $A_B$  – это *минимальная* величина энергии, затрачиваемая на выход электрона из металла. В этом случае электрон приобретает максимальную кинетическую энергию  $E_{\text{кин\_MAX}}$ . В других случаях возможна ситуация, при которой электрону понадобится затратить больше энергии для выхода, поэтому и его кинетическая энергия будет меньше максимальной.

Данная теория позволила объяснить экспериментальные результаты для фототока.

Если между катодом и анодом приложить обратное напряжение (при котором потенциал катода выше потенциала анода), то на электроны, вылетающие из катода, будет действовать сила, направленная против их движения. Следовательно, электроны будут тормозиться. Электрический ток прекратится в тот момент, когда максимальная кинетическая энергия электронов будет израсходована на работу против сил электрического поля

$$0 - E_{\text{КИН\_МАХ}} = A_{\text{КУЛ}} = q(\varphi_{\text{К}} - \varphi_{\text{А}}) = -eU_3$$

(здесь учтено, что заряд электрона отрицательный  $q = -e$ .) Тогда, с учётом формулы Эйнштейна для фотоэффекта  $E_{\text{КИН\_МАХ}} = \hbar\omega - A_{\text{В}}$  находим выражение для задерживающего напряжения

$$U_3 = \frac{\hbar\omega - A_{\text{В}}}{e} \quad \text{или} \quad U_3 = \frac{h\nu - A_{\text{В}}}{e}.$$

Т.о. задерживающее напряжение зависит от частоты падающего излучения.

Если выполняется равенство  $\hbar\omega = A_{\text{В}}$  или  $h\nu = A_{\text{В}}$ , то фототок прекращается даже при отсутствии напряжения между катодом и анодом. Величина частоты света, при которой фототок прекращается, называется *красной границей* фотоэффекта  $\omega_{\text{КР}} = \frac{A_{\text{В}}}{\hbar}$  или  $\nu_{\text{КР}} = \frac{A_{\text{В}}}{h}$ .

(Название «красная граница» возникло потому, что для некоторых металлов эта частота соответствует красному цвету.)

Соответственно, длина волны красной границы фотоэффекта  $\lambda_{\text{КР}} = \frac{hc}{A_{\text{В}}}$ .

Пример.

Элемент	$A_{\text{В}}$ , эВ	$A_{\text{В}}$ , Дж	$\nu_{\text{КР}}$ , Гц	$\lambda_{\text{КР}}$ , м
K	2,15	$3,44 \cdot 10^{-19}$	$5,19 \cdot 10^{14}$	$5,77849 \cdot 10^{-7}$
Na	2,27	$3,63 \cdot 10^{-19}$	$5,48 \cdot 10^{14}$	$5,47302 \cdot 10^{-7}$
Cu	4,47	$7,15 \cdot 10^{-19}$	$1,08 \cdot 10^{15}$	$2,77936 \cdot 10^{-7}$

Число вылетающих электронов пропорционально числу квантов, поэтому при увеличении освещённости, когда число квантов излучения увеличивается, количество электронов тоже увеличивается, следовательно, фоток увеличивается.

#### ФОТОНЫ.

На основе результатов теории фотоэффекта А. Эйнштейн предложил гипотезу, что излучение не только излучается и поглощается квантами, но распространяется в пространстве тоже квантами. Квант электромагнитного излучения соответствует порции (части) электромагнитной волны, которую позднее химик Гилберт Льюис предложил назвать *фотон* (1926 г.).

С учётом этого названия формула Эйнштейна для фотоэффекта

$$\hbar\omega = A_{\text{В}} + E_{\text{КИН\_МАХ}} \quad \text{или} \quad h\nu = A_{\text{В}} + E_{\text{КИН\_МАХ}}$$

можно трактовать так: энергия *фотона* расходуется на совершение электроном работы выхода из металла и на сообщение электрону кинетической энергии.

*Замечание.* В многофотонных процессах для выхода электрона требуется несколько фотонов. В этом случае уравнение Эйнштейна примет вид

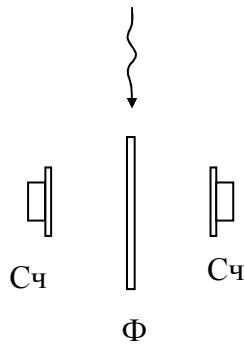
$$N\hbar\omega = A_{\text{В}} + E_{\text{КИН\_МАХ}} \quad \text{или} \quad N h\nu = A_{\text{В}} + E_{\text{КИН\_МАХ}}$$

где  $N$  – число фотонов.

*Замечание.* В отличие от внешнего фотоэффекта внутренний фотоэффект – это переход электрона в новое состояние с более высоким уровнем энергии.

Предположение о том, что энергия распространяется порциями противоречит результатам теории Максвелла, подтверждённым в оптике теорией Френеля-Кирхгофа. Излучение является суперпозицией сферических волн от вторичных точечных источников, которые распространяются во всех направлениях. Отсутствие излучения в каком-то направлении объясняется дифракцией и интерференцией волн.

Вальтер Боте в 1925 году провёл опыт, подтверждающий существование квантов излучения (фотонов). Схема опыта такова: тонкая металлическая фольга облучалась слабым рентгеновским излучением. По обе стороны от фольги стояли газоразрядные счётчики для регистрации излучения от фольги. По классической теории излучение фольги



должно представлять собой сферические волны, распространяющиеся во все стороны. Следовательно, оба счётчика должны одновременно зарегистрировать эту волну. Если же под действием рентгеновского излучения фольга испускает кванты, движущиеся в разных направлениях, то счётчики срабатывали бы не одновременно. Оказалось, что моменты регистрации волн у обоих счётчиков не совпадали. Т.о. было подтверждено, что излучение состоит из квантов (фотонов).

Энергия фотона зависит от частоты. Т.к. при переходе к другой движущейся системе отсчёта частота, вообще говоря, меняется, то и энергия фотона должна меняться. Из результатов, полученных в СТО, следует, что при переходе из одной системы отсчёта К в другую систему К' (которая движется в

направлении сигнала – оси X), частота сигнала меняется следующим образом  $\omega' = \omega \frac{1 - \frac{v}{c}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ ,

поэтому энергия фотона  $E = \hbar\omega$  тоже меняется  $E' = E \frac{1 - \frac{v}{c}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ . Но законы преобразования

энергии и импульса (вдоль направления движения – оси X) в СТО имеют вид  $E' = \frac{E - v \cdot p_x}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ .

Откуда следует, что для импульса фотона справедливо соотношение  $p = \frac{E}{c}$ . Инвариантной величиной при переходе от одной системы отсчёта к другой является соотношение между энергией, импульсом и массой покоя  $E^2 - p^2 c^2 = m_0^2 c^4$ . Для фотона  $p = \frac{E}{c}$ , поэтому его масса покоя должна быть равной нулю  $m_0 = 0$ . Фотон всегда движется со скоростью света – его нельзя остановить, поэтому говорить об его массе покоя нельзя.

Из соотношения  $p = \frac{E}{c}$  следует, что  $p = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$  или  $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ . Если движение фотона описать волновым вектором  $\vec{k}$ , где волновое число  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , то вектор импульса фотона можно записать в виде  $\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$ .

Такие явления как интерференция и дифракция света свидетельствуют о волновой природе света. Фотоэффект свидетельствует, что свет является потоком частиц (корпускул). Таким образом, свет обнаруживает *корпускулярно-волновой дуализм* – в одних явлениях он ведёт как волны, а в других как набор частиц.

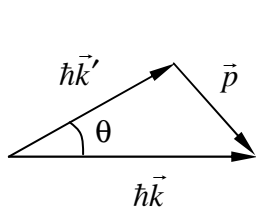
Рассмотрим явление, в котором одновременно проявляются и волновые и корпускулярные свойства света.

#### Эффект Комптона.

Эффект Комптона (Комптон-эффект) – явление, состоящее в изменении длины волны рассеянного излучения при пропускании через вещество излучения рентгеновского диапазона. Изменение длины волны не зависит от свойств вещества, но зависит от угла рассеяния. Если

длина волны падающего излучения  $\lambda$ , длина волны рассеянного  $\lambda'$ , а  $\theta$  - угол рассеяния, то опыт показывает, что справедлива формула для изменения длины волны  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta)$ , где постоянная величина  $\lambda_C = 2,4263 \cdot 10^{-12}$  м называется *комптоновской постоянной* (комптоновской длиной волны для электрона). Уменьшение энергии фотона после комптоновского рассеяния называется *комптоновским сдвигом*.

Для описания этого явления рассмотрим упругое соударение фотона и электрона. Т.к. скорость электрона много меньше скорости света, то при описании соударения можно считать, что электрон покоится. При этом будем рассматривать свободные электроны – т.е. такие электроны, которые относительно слабо связаны с атомами вещества. (В случае сильной связи электрон и атом ведут себя как единое целое при таком ударе.) При ударе фотона с (покоившимся электроном) сохраняется вектор импульса  $\hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}' + \vec{p}$ .



Здесь  $\hbar \vec{k}$ ,  $\hbar \vec{k}'$  - импульсы фотона до и после удара,  $\vec{p}$  - импульс электрона после удара (начальный импульс электрона равен нулю).

Так как удар упругий, то сохраняется энергия  $E + m_e c^2 = E' + E_e$

$E = h\nu$ ,  $E' = h\nu'$  - энергия фотона до и после удара,  $m_e c^2$  - энергия покоя электрона,  $E_e$  - энергия электрона после удара.

По теореме косинусов запишем закон сохранения импульса в виде равенства

$$p^2 = (\hbar k)^2 + (\hbar k')^2 - 2 \cdot \hbar k \cdot \hbar k' \cdot \cos \theta \quad \text{или} \quad p^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2 \cdot \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h}{\lambda'} \cdot \cos \theta.$$

Но для электрона справедливо выражение  $E_e^2 - p^2 c^2 = (m_e c^2)^2$ , откуда  $\frac{E_e^2}{c^2} - m_e^2 c^2 = p^2$ . Тогда предыдущее равенство примет вид

$$\frac{E_e^2}{c^2} - m_e^2 c^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2 \cdot \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h}{\lambda'} \cdot \cos \theta$$

Из выражения для закона сохранения энергии  $E_e^2 = (E + m_e c^2 - E')^2 = (h\nu + m_e c^2 - h\nu')^2$ .

Т.к.  $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ,  $\nu' = \frac{c}{\lambda'}$ , то  $E_e^2 = \frac{h^2 c^2}{\lambda^2} + 2h \frac{c}{\lambda} m_e c^2 - 2h^2 \frac{c^2}{\lambda \lambda'} + m_e^2 c^4 - 2h \frac{c}{\lambda'} m_e c^2 + \frac{h^2 c^2}{\lambda'^2}$ .

Подставим это соотношение в выражение закона сохранения импульса:

$$\frac{\frac{h^2 c^2}{\lambda^2} + 2h \frac{c}{\lambda} m_e c^2 - 2h^2 \frac{c^2}{\lambda \lambda'} + m_e^2 c^4 - 2h \frac{c}{\lambda'} m_e c^2 + \frac{h^2 c^2}{\lambda'^2}}{c^2} - m_e^2 c^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2 \cdot \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h}{\lambda'} \cdot \cos \theta$$

$$\frac{h^2}{\lambda^2} + 2h \frac{c}{\lambda} m_e - 2 \frac{h^2}{\lambda \lambda'} + m_e^2 c^2 - 2h \frac{c}{\lambda'} m_e + \frac{h^2}{\lambda'^2} - m_e^2 c^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2 \cdot \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h}{\lambda'} \cdot \cos \theta$$

После сокращений и перестановок остаётся равенство  $\frac{m_e c}{\lambda} - \frac{m_e c}{\lambda'} = \frac{h}{\lambda \cdot \lambda'} (1 - \cos \theta)$ .

Умножим на  $\lambda \cdot \lambda'$  и разделим на  $m_e c$ :

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

Получили формулу, совпадающую с экспериментальной. Для постоянной Комптона получается выражение

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8} \approx 0,24271 \cdot 10^{-11} \text{ м}$$

тоже практически совпадающее с экспериментальным.

Явление обнаружено американским физиком Артуром Комптоном в 1923 году для рентгеновского излучения. В 1927 Комптон получил за это открытие Нобелевскую премию по физике.

В комптон-эффекте фотоны одновременно проявляют корпускулярные (импульс) и волновые (длина волны).

*Замечание.* Для наблюдения эффекта Комптона необходимо, чтобы длина волны излучения была примерно равна комптоновской постоянной. Для свободных электронов это значение

$\lambda_C \approx 2,43 \cdot 10^{-12}$ . При соударении фотона с электронами, сильно связанными с атомами, надо рассматривать атом как единое целое. В этом случае  $\lambda_C \sim 10^{-16}$  м и изменение длины рассеянного излучения является величиной гораздо меньшего порядка.

*Замечание.* Эффектом, обратным эффекту Комптона, является увеличение частоты света, претерпевающего рассеяние на релятивистских электронах, имеющих энергию выше, чем энергия фотонов. То есть в процессе такого взаимодействия происходит передача энергии от электрона фотону. *Обратный эффект Комптона* ответственен за рентгеновское излучение галактических источников, рентгеновскую составляющую реликтового фонового излучения, трансформацию плазменных волн в высокочастотные электромагнитные волны.

### Лекции 3 - 4. Волновые свойства микрочастиц.

*Гипотеза де Бройля. Дифракция микрочастиц. Принцип неопределенности Гейзенберга. Задание состояния микрочастицы. Волновая функция, ее статистический смысл и условия, которым она должна удовлетворять. Принцип суперпозиции квантовых состояний. Общее уравнение Шредингера. Уравнение Шредингера для стационарных состояний.*

#### Гипотеза де Бройля

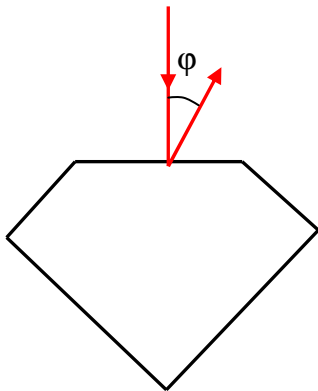
В 1924 году французский физик Луи де Бройль высказал гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм характерен не только для фотонов, но и вообще для всех частиц (электронов, протонов, атомов и так далее)

Каждой частице, обладающей импульсом  $p$  можно сопоставить волну, длина которой  $\lambda = \frac{h}{p}$ , где  $h$  – постоянная Планка. Эти волны получили название *волн де Бройля*.

В 1927 году американские учёные Клинтон Дэвиссон и Лестер Джермер провели опыт по проверке гипотезы.

#### Опыт Дэвиссона-Джермера.

Они исследовали дифракцию электронов при отражении от монокристалла никеля.

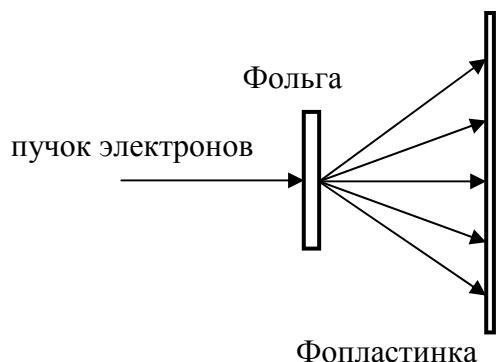


Пучок монохроматических электронов (т.е. электронов с одинаковой кинетической энергией) из электронной пушки падал на шлифованную поверхность кристалла никеля, структура которого была хорошо известна из данных рентгеноструктурного анализа. Рассеянные от кристалла электроны улавливались специальным электродом, присоединенным к чувствительному гальванометру. Приемник электронов мог перемещаться так, чтобы улавливать электроны, рассеиваемые под различными углами  $\phi$ . Интенсивность отражённого пучка оценивалась по силе тока.

Если длина волны де Бройля будет меньше размера решётки, то должна наблюдаться дифракционная картина, аналогичная картине при дифракции рентгеновских лучей на кристалле никеля.

Максимум при отражении от какой-то системы главных атомных плоскостей определяется формулой Вульфа-Брэггов  $2d \sin \theta = n \cdot \lambda$ . Результаты опыта полностью подтвердили гипотезу де Бройля.

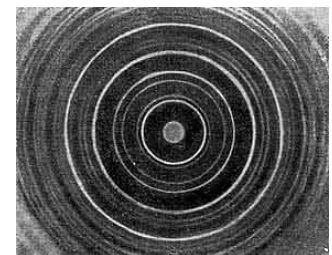
В 1927 году Петр Саввич Тартаковский, а в 1928 году английский физик Дж. Томсон (сын Дж. Томсона, открывшего электрон) получили новое подтверждение гипотезы де Бройля. В своих экспериментах Тартаковский наблюдал дифракционную картину при прохождении



медленных электронов через поликристаллы никеля, а Томсон наблюдал дифракционную картину, возникающую при прохождении пучка электронов через тонкую поликристаллическую фольгу из золота.

Впоследствии дифракционные явления были обнаружены также для нейтронов, протонов, атомных и молекулярных пучков. Экспериментальное доказательство наличия волновых

свойств микрочастиц привело к выводу о том, что это универсальное явление природы, общее свойство материи. Следовательно, волновые свойства должны быть присущи и макроскопическим телам. Однако вследствие большой массы макроскопических тел их волновые свойства не могут быть обнаружены экспериментально. Например, песчинке массой 0,1 г, движущийся со скоростью



Дифракция электронов на серебряной фольге

0,1 м/с соответствует волна де Бройля с длиной порядка  $10^{-30}$  м, т. е. приблизительно на 20 порядков меньше размеров атомов. Такая длина волны лежит за пределами доступной наблюдению области. Этот пример показывает, что макроскопические тела могут проявлять только корпускулярные свойства.

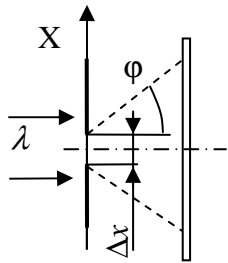
Таким образом, учёт волновых свойств частиц необходим в случае, когда характерный размер задачи сопоставим с длиной волны де Бройля.

#### Принцип неопределённости Гейзенберга.

Принцип неопределённости, открытый Вернером Гейзенбергом в 1927 г., является одним из фундаментальных принципов квантовой механики.

В классической физике погрешности измерения параметров частицы обусловлены только точностью измерений. И если физические величины являются независимыми друг от друга, то погрешности их измерений тоже являются независимыми. При указании значений измеренной физической величины приводится доверительный интервал, в котором она принимает значения с некоторой вероятностью. Полуширина этого доверительного интервала пропорциональна среднеквадратичному отклонению.

Оказывается, что учёт волновых свойств частиц накладывает принципиальные ограничения на точность измерения физических величин. Эти ограничения не связаны с погрешностями измерений, а являются следствиями корпускулярно-волнового дуализма частиц.



Рассмотрим дифракцию частицы на щели. Частица движется по нормали к экрану с щелью, поэтому её вектор импульса направлен перпендикулярно к экрану. Если вдоль экрана, перпендикулярно щели направить ось X, то можно сказать, что до щели у частицы был нулевой импульс вдоль оси X. Пусть ширина щели равна  $\Delta x$ . После дифракции на щели частицы как волны де Бройля положение первого минимума дифракционной картины задаётся величиной угла  $\varphi$ , где  $\Delta x \cdot \sin \varphi = \lambda$ . Т.е. можно сказать, что после щели у частицы появится дополнительный импульс вдоль оси X  $\Delta p_x$ , что приведёт к отклонению частицы от направления

первоначального движения. При этом  $\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \sin \varphi$ . Т.к. величина угла  $\varphi$  мала, то

при этом  $\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \sin \varphi$ . Т.к. величина угла  $\varphi$  мала, то

$\frac{\Delta p_x}{p} = \Delta \varphi \approx \sin \varphi = \frac{\lambda}{\Delta x}$ . Но  $\lambda = \frac{h}{p}$ , поэтому получаем, что  $\Delta p_x \cdot \Delta x = h$ . Это равенство можно

трактовать следующим образом – при более точном определении положения частицы на оси X ( $\Delta x \rightarrow 0$ ) мы получаем большую погрешность в определении импульса вдоль этой оси ( $\Delta p_x \rightarrow \infty$ ).

Этот факт отражает *принцип неопределённости* – в природе не существует состояния частицы с точно определёнными значениями координаты и проекции импульса на эту ось. Таким образом, понятие траектории частицы в микромире теряет смысл.

Измерение величины одного параметра приводит к изменению величины какого-то другого параметра, следовательно, появляется неопределённость этого параметра. Чтобы отразить этот факт, принцип неопределённости можно сформулировать следующим образом – любое измерение состояния системы приводит к изменению этого состояния.

Математическим выражением термина *неопределённость* физической величины является *среднеквадратичное* отклонение значения этой величины, получаемое в процессе наблюдения за частицей (системой). Это среднеквадратичное отклонение физической величины  $A$  принято обозначать  $\Delta A$ .

Две физические величины называются *канонически сопряженными*, если для них можно записать соотношение неопределённости Гейзенберга. Например, координата частицы и им-

пульс вдоль этой координаты являются канонически сопряженными. Тогда для них можно записать  $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ , аналогично  $\Delta p_y \cdot \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}$  и  $\Delta p_z \cdot \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}$ .

В любом состоянии частицы нельзя одновременно как угодно точно измерить импульс и координату частицы вдоль одной оси.

*Замечание.* В этих соотношении неравенство надо понимать как оценочное, т.к. при расчётах получаются оценки по порядку величин.

Но координата и импульс *вдоль другой* координаты не являются сопряжёнными величинами. Например  $\Delta p_x \cdot \Delta y = 0$  - т.е. эти величины могут быть измерены *одновременно* как угодно точно.

Существуют и другие сопряжённые величины. Например, энергия и время  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ ,

где  $\Delta E$  – неопределённость значения энергии,  $\Delta t$  – неопределённость интервала времени, в течение которого проводились наблюдения за значением энергии.

Отсюда, в частности, следует оценка времени пребывания системы в нестабильном состоянии с «избыточным» значением энергии  $\tau \sim \frac{\hbar}{\Delta E}$ .

И, наоборот, если неопределённость времени наблюдения за состоянием системы равна  $\Delta t$ , то в этом состоянии неопределённость энергии  $\Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t}$ .

*Замечание.* В случае, когда длина волны де Бройля  $\lambda$  значительно меньше характерного размера задачи  $L$  можно пользоваться законами классической физики. Действительно, если  $\frac{\lambda}{L} \ll 1$ , т.е.

$$\frac{h}{pL} = \frac{2\pi\hbar}{pL} \ll 1, \text{ то, считая, что } \Delta p_x = p \text{ и применяя соотношение неопределённости } \Delta x = \frac{\hbar}{2p},$$

получаем оценку погрешности  $\frac{\Delta x}{L} \ll 1$ .

В итоге, можно сказать, что при учёте волновых свойств частицы теряет смысл не только понятие траектории, но и деление энергии частицы на потенциальную и кинетическую. Ибо потенциальная энергия зависит от координаты, а кинетическая от импульса.

Равенство  $E = E_k + E_{\text{пот}}$  выполняется только для средних значений энергий

### Волновая функция

Состояние микрочастицы, характеристики её движения, взаимодействия с другими частицами и т.д. полностью задаётся функцией, которую называют *волновой функцией* и обозначают  $\Psi$  (пси-функция).

*Принцип суперпозиции состояний.* Если частица может находиться в одном состоянии и может находиться в другом состоянии, то она может находиться и в состоянии, являющимся *суперпозицией* этих состояний. Это означает, что если первое состояние описывается волновой функцией  $\Psi_1$ , а второе  $\Psi_2$ , то состояние, являющееся суперпозицией состояний описывается волновой функцией, являющейся их линейной комбинацией  $\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ , где  $c_1$  и  $c_2$  – некоторые константы.

Суперпозиция состояний в квантовой механике отличается от состояний от суперпозиции колебаний в классической физике. В классической физике суперпозиция колебаний приводит к новому колебанию с большей или меньшей амплитудой. Возможнее даже случай нулевой амплитуды. В квантовой механике же нулевая амплитуда соответствует отсутствию частицы в данном состоянии.

Для того чтобы определить какую-либо физическую величину, описывающее состояние частицы, надо осуществить некие математические операции над волновой функцией, соответствующей данному состоянию, и проанализировать полученные результаты.



Процесс определения значения какой-либо физической величины  $A$  в соответствующем состоянии частицы, по своей сути является процессом измерения данной физической величины, изменяющим состояние частицы. Поэтому в результате измерения должна измениться волновая функция данного состояния. Таким образом, процесс измерения следует описывать правилом, по которому меняется волновая функция, т.е. следует задать соответствующую «функцию от функции» или оператор физической величины  $\hat{A}$ , сопоставляющий волновой функции одного состояния  $\Psi$  волновую функцию другого состояния  $\tilde{\Psi}$ . Математически процесс измерения можно записать так  $\hat{A}\Psi = \tilde{\Psi}$ . Принцип суперпозиции требует, чтобы этот оператор был *линейным*, т.е.  $\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2$ .

Допустим, что при измерении некоторой физической величины в состоянии с волновой функцией  $\Psi_1$  получается одно значение  $A_1$ , а в состоянии с  $\Psi_2$  – другое  $A_2$ . Какое значение получится при измерении в состоянии, являющемся суперпозицией этих состояний

$$\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2?$$

Процесс измерения любой физической величины носит вероятностный характер. Т.е. тот или иной результат измерения можно получить с какой-то определённой вероятностью. Это означает, что при однократных измерениях мы будем получать значения  $A_1$  или  $A_2$  с некоторыми, вообще говоря, разными вероятностями  $p_1$  и  $p_2$ .

*Замечание.* Состояние, которое можно описать волновой функцией принято называть *чистым* состоянием. В обратном случае, состояния называются *смешанными*.

Требования, чтобы измерения сводились к операциям над волновыми функциями, приводит к условию, налагаемому на математическое выражение для волновой функции – она должна быть функцией, принимающей значения в *комплексном пространстве*. Поэтому для неё справедливы все операции над комплексными числами.

Математическое отступление.

Напомним, что символом  $i$  обозначается такое комплексное число, что  $i^2 = -1$ . Любое комплексное число  $z$  может представлено в виде  $z = x + i \cdot y$ , где  $x$  и  $y$  – вещественные числа. При этом число  $x$  называется *вещественной* частью числа  $z$  и обозначается  $x = \text{Re}(z)$ , а число  $y$  называется *мнимой* частью числа  $z$  и обозначается  $y = \text{Im}(z)$ .

Число  $z^*$  является *комплексно сопряжённым* числу  $z = x + i \cdot y$ , если  $z^* = x - i \cdot y$ .

В частности  $i^* = -i$ . Для вещественного числа  $z^* = z$ .

Сумма двух комплексных чисел  $z_1 = x_1 + iy_1$  и  $z_2 = x_2 + iy_2$  равна

$$z_1 + z_2 = x_1 + x_2 + i(y_1 + y_2).$$

Произведение двух комплексных чисел  $z_1 = x_1 + iy_1$  и  $z_2 = x_2 + iy_2$  равно

$$z_1 \cdot z_2 = (x_1 + iy_1) \cdot (x_2 + iy_2) = x_1x_2 + ix_1y_2 + iy_1x_2 + i^2y_1y_2 = x_1x_2 - y_1y_2 + i(x_1y_2 + y_1x_2)$$

и не зависит от порядка сомножителей.

В частности,  $z \cdot z^* = x^2 + y^2 = z^* \cdot z$ .

Величина  $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$  называется *модулем* комплексного числа  $z = x + i \cdot y$ .

Т.е.  $z \cdot z^* = z^* \cdot z = |z|^2$ . Кроме того,  $|z| = |z^*|$ .

Для того чтобы разделить одно комплексное число  $z_1 = x_1 + iy_1$  на другое  $z_2 = x_2 + iy_2$  надо знаменатель и числитель дроби умножить на комплексно сопряжённое число к знаменателю

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{z_1 z_2^*}{|z_2|^2}. \text{ В частности, } \frac{1}{i} = -i.$$

$$\text{Для числа } \frac{z}{|z|} = \frac{x}{|z|} + i \frac{y}{|z|} \text{ можно записать } \left| \frac{z}{|z|} \right|^2 = \frac{x^2}{|z|^2} + \frac{y^2}{|z|^2} = 1.$$

Следовательно, существует такой угол  $\varphi$ , что  $\frac{x}{|z|} = \cos \varphi$ ,  $\frac{y}{|z|} = \sin \varphi$ . Тогда комплексное число  $z = x + i \cdot y$  можно записать в виде  $z = |z|(\cos \varphi + i \cdot \sin \varphi)$ .

Соотношение Эйлера  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \cdot \sin \varphi$  можно получить следующим образом. Обозначим  $f(\varphi) = \cos \varphi + i \cdot \sin \varphi$ . Тогда справедливо соотношение

$$f'(\varphi) = -\sin \varphi + i \cdot \cos \varphi = i \cdot (\cos \varphi + i \cdot \sin \varphi) = i \cdot f.$$

Решением этого дифференциального уравнения, с учётом условия  $f(0) = 1$ , является функция  $f(\varphi) = e^{i\varphi}$ , поэтому  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \cdot \sin \varphi$ . Это соотношение позволяет привести ещё более короткую запись для комплексного числа  $z = |z|e^{i\varphi}$ .

С учётом такой формы записи получаем, что  $z^* = |z|e^{-i\varphi}$ ,  $z_1 \cdot z_2 = |z_1| \cdot |z_2|e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)}$ ,  $z \cdot z^* = |z|^2$ .  
 $(z_1 \cdot z_2)^* = (|z_1|e^{i\varphi_1} \cdot |z_2|e^{i\varphi_2})^* = (|z_1| \cdot |z_2|e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)})^* = |z_1| \cdot |z_2|e^{-i(\varphi_1 + \varphi_2)} = |z_1|e^{-i\varphi_1} \cdot |z_2|e^{-i\varphi_2} = z_1^* \cdot z_2^*.$

Возведение комплексного числа в степень  $z^n = |z|^n e^{in\varphi}$ .

Извлечение корня  $n$ -й степени  $\sqrt[n]{z} = \sqrt[n]{|z|} \cdot e^{i\frac{\varphi + 2\pi k}{n}}$  (где  $k=0, \dots, n-1$ ) даёт  $n$  корней.

*Замечание.*  $|e^{i\varphi}| = \sqrt{\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi} = 1$ .

### Статистический смысл волновой функции.

Макс Борн предложил следующий смысл волновой функции:  $dP$  - вероятность того, что частица находится в некоторой малой области пространства, объём которой  $dV$ , определяется равенством

$$dP = |\Psi|^2 \cdot dV$$

т.е. квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности нахождения частицы в некоторой области пространства  $\frac{dP}{dV} = |\Psi|^2$ . Поэтому для нахождения вероятности того, что

частица находится в некоторой области  $V$  надо вычислить интеграл  $P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV$ .

Следовательно, если частица *не может* находиться в области  $V$ , то  $P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 0$ .

Т.к.  $|\Psi|^2 \geq 0$ , то это равенство возможно при  $|\Psi| = 0$ , т.е.  $\Psi = 0$  в этой области  $V$ .

Если частица *обязательно* находится в области  $V$ , то  $P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 1$ .

Следовательно, квадрат модуля волновой функции должен быть интегрируемой функцией по этой области.

*Замечание.* Вероятность того, что частица находится в какой-то определённой точке, равна нулю, т.к. в этом случае объём соответствующей области нулевой.

### Уравнение Шрёдингера.

Волновая функция должна являться решением уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi$$

где  $m$  – масса частицы,  $U$  – действительная функция координат и времени, такая, что вектор  $-\text{grad}U$  является классическим аналогом силы, действующей на частицу. В случае, когда  $U$  не зависит от времени, она совпадает с потенциальной энергией.

$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$  - результат действия на функцию  $\Psi$  оператора Лапласа.

Следовательно, волновая функция должна быть непрерывно-дифференцируемой один раз по времени и два раза по пространственным координатам.

Уравнение  $i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + U \cdot \Psi$  носит название (*временного*) уравнения Шрёдингера

по имени немецкого физика Эрвина Шрёдингера, предложившего его в 1926 году.

**Уравнение Шрёдингера является одним из постулатов (аксиом) квантовой механики и играет в атомной физике такую же фундаментальную роль, как уравнения Ньютона в классической механике и уравнения Максвелла в классической электродинамике.**

Уравнение Шрёдингера является линейным, т.е. линейная комбинация решений тоже является решением. Действительно, если каждая из функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  является решением, то их линейная комбинация  $\Psi_3 = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$  (где  $c_1$  и  $c_2$  – некоторые константы) тоже является решением, т.к. уравнение  $i\hbar \frac{\partial\Psi_3}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi_3 + U \cdot \Psi_3$  в силу равенств

$$i\hbar \frac{\partial(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) + U \cdot (c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2)$$

$$\text{или } c_1 i\hbar \frac{\partial\Psi_1}{\partial t} + c_2 i\hbar \frac{\partial\Psi_2}{\partial t} = -c_1 \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi_1 + c_1 U \cdot \Psi_1 - c_2 \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi_2 + c_2 U \cdot \Psi_2$$

является линейной комбинацией уравнений

$$i\hbar \frac{\partial\Psi_1}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi_1 + U \cdot \Psi_1 \text{ и } i\hbar \frac{\partial\Psi_2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi_2 + U \cdot \Psi_2.$$

Следовательно, *принцип суперпозиции состояний* не противоречит уравнению Шрёдингера.

*Замечание.* Сопряжённое уравнение Шрёдингера для волновой функции имеет вид

$$\left( i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} \right)^* = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi + U \cdot \Psi \right)^* \text{ или } -i\hbar \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi^* + U \cdot \Psi^*.$$

**Пример.** Найдём волновую функцию для свободно движущейся частицы в одномерной области (волны де Бройля). В этом случае  $U=0$ , поэтому уравнение Шрёдингера принимает вид

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\Psi.$$

Пусть частица движется вдоль оси  $X$ , тогда получаем соотношение  $i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ .

Решение этого уравнения ищем в виде плоской волны ( $C=\text{const}$ )

$$\Psi = C \cdot e^{i(kx - \omega t)} = C \cdot (\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)).$$

После подстановки в уравнение выражений для производных

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [C e^{i(kx - \omega t)}] = -i\omega C e^{i(kx - \omega t)}, \quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} [C e^{i(kx - \omega t)}] = -k^2 C e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\text{получаем равенство } i\hbar \{-i\omega C e^{i(kx - \omega t)}\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \{-k^2 C e^{i(kx - \omega t)}\}.$$

После сокращений остаётся  $\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ . Если по аналогии с фотоном свободной частице приписать энергию  $E = \hbar\omega$  и импульс  $p = \hbar k$ , то получим классическое соотношение между кинетической энергией и импульсом  $E = \frac{p^2}{2m}$ .

Рассмотрим решение типа плоской волны для частицы, которая движется в одномерной области, в которой  $U(x)$  не зависит от времени. Т.к. в этом случае  $\Psi = Ce^{i(kx-\omega t)}$  и уравнение Шрёдингера имеет вид  $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U \cdot \Psi$ , то после подстановки функции в уравнение получаем равенство

$$i\hbar \left\{ -i\omega Ce^{i(kx-\omega t)} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ -k^2 Ce^{i(kx-\omega t)} \right\} + U \cdot Ce^{i(kx-\omega t)}.$$

Получаем соотношение  $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + U$ , которое можно трактовать как определение механической энергии в классической физике  $E = E_k + U$ . ♣

*Замечание.* Для свободной частицы квадрат модуля волновой функции равен

$$|\Psi|^2 = \left| Ce^{i(kx-\omega t)} \right|^2 = |C|^2 \left( \cos^2(kx-\omega t) + \sin^2(kx-\omega t) \right) = |C|^2.$$

Поэтому интеграл  $P(a < x < b) = \int_a^b |\Psi|^2 dx = |C|^2 \cdot (b-a)$  имеет смысл только для ограниченной области.

### Условие нормировки.

Уравнение Шрёдингера линейное, поэтому если решением является функция  $\Psi$ , то решением является также и функция  $\Psi_1 = c \cdot \Psi$ , где  $c = \text{const}$ . В этом смысле говорят, что волновая функция определяется с точностью до константы.

Из физического смысла следует, что для всей области определения волновой функции  $V$  справедливо утверждение – вероятность того, что частица находится в этой области  $V$ , равна единице

$$P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 1.$$

Следовательно, если при решении задачи о поиске волновой функции в некоторой области было найдено решение  $\Psi_1$ , но при этом  $\int_V |\Psi_1|^2 dV = |C|^2 \neq 1$ , то в качестве волновой функции следует

взять функцию  $\Psi_2 = \frac{1}{C} \Psi_1$ , т.к. она тоже является решением и для неё выполняется

$$\int_V |\Psi_2|^2 dV = \int_V \left| \frac{\Psi_1}{C} \right|^2 dV = \frac{1}{|C|^2} \int_V |\Psi_1|^2 dV = \frac{1}{|C|^2} |C|^2 = 1.$$

Правило выбора решения  $\Psi$ , такого, что для него во всей области выполняется условие

$$P(V) = \int_V |\Psi|^2 dV = 1$$

называется *условием нормировки решения на единицу* или просто *условием нормировки*.

*Замечание.* В принципе, формально можно выбрать и другое условие нормировки – например:

$$\int_V |\Psi|^2 dV = 2,$$

но тогда квадрат модуля волновой функции уже не будет иметь смысл плотности вероятности.

### Вектор плотности потока вероятности.

В классической физике из уравнений движения частиц или уравнений Максвелла следуют разнообразные законы сохранения и уравнения непрерывности. Посмотрим, как обстоит дело с уравнением Шрёдингера.

Если частица не находится постоянно в некоторой области пространства  $V$ , то вероятность её нахождения в этой области должна зависеть от времени. Поэтому в этом случае

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \int_V |\Psi|^2 dV \right) \neq 0.$$

Предполагаем, что объём неподвижен, поэтому

$$\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \int_V |\Psi|^2 dV \right) = \int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \right) dV = \int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} (\Psi \Psi^*) \right) dV = \int_V \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) dV.$$

Из уравнения Шрёдингера следует, что

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi \right\}.$$

Из сопряжённого уравнения Шрёдингера

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U \cdot \Psi^* \right\}.$$

Тогда

$$\frac{dP}{dt} = \int_V \left( \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi \right\} \Psi^* - \frac{1}{i\hbar} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U \cdot \Psi^* \right\} \Psi \right) dV$$

откуда после сокращений

$$\frac{dP}{dt} = \int_V \left( -\frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \Psi) \Psi^* + \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \Psi^*) \Psi \right) dV = -\frac{i\hbar}{2m} \int_V ((\Delta \Psi^*) \Psi - (\Delta \Psi) \Psi^*) dV.$$

Т.к.  $\text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^*) = (\text{grad} \Psi, \text{grad} \Psi^*) + \Psi \Delta \Psi^*$  и

$\text{div}(\Psi^* \text{grad} \Psi) = (\text{grad} \Psi, \text{grad} \Psi^*) + \Psi^* \Delta \Psi$ , то

$\text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi) = \Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi$ .

С учётом теоремы Остроградского-Гаусса получаем

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int_V \text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi) dV = -\frac{i\hbar}{2m} \oint_S ((\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi), d\vec{S}).$$

Вектор плотности вероятности определяется соотношением

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \cdot \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \cdot \text{grad} \Psi).$$

Уравнение непрерывности для вероятности в интегральной форме:

$$\frac{dP}{dt} = -\oint_S (\vec{j}, d\vec{S})$$

изменение вероятности нахождения частицы в некотором объёме  $V$  равно с обратным знаком потоку вектора плотности вероятности через замкнутую поверхность  $S$ , ограничивающую этот объём.

Т.к. для неподвижного объёма справедливо равенство  $\frac{dP}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \int_V |\Psi|^2 dV \right) = \int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \right) dV$ ,

то из равенства  $\int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \right) dV = -\frac{i\hbar}{2m} \int_V \text{div}(\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi) dV$  можно получить уравнение

непрерывности для вероятности в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = -\text{div}(\vec{j}).$$

Стационарные состояния.

Состояния частицы, для которых значение энергии определено однозначно, называются *стационарными* состояниями.

*Замечание.* Из принципа неопределённости для времени и энергии  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$  следует, что если неопределённость энергии в каком-то состоянии стремится к нулю  $\Delta E \rightarrow 0$ , то время пребывания системы в этом состоянии должно быть бесконечно большим. В этом смысле состояние называется *стационарным*.

Как будет установлено далее (в теории операторов), волновая функции частицы в стационарном состоянии со значением энергии  $E$  принимает особый вид

$$\Psi = \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

где функция «пси малая»  $\psi$  зависит только от координат частицы, но не зависит от времени, поэтому её иногда называют *координатной частью волновой функции стационарного состояния*.

В стационарном состоянии плотность вероятности *не зависит от времени*. Действительно, плотность вероятности равна квадрату модуля волновой функции

$$|\Psi|^2 = \left| \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi|^2 \cdot \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi|^2.$$

Следовательно, для стационарного состояния уравнение непрерывности для вероятности примет вид:

$$\operatorname{div}(\vec{j}) = 0.$$

Соответственно, вектор плотности вероятности для стационарного состояния

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \cdot \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \cdot \operatorname{grad} \psi).$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния.

Необходимым условием стационарности состояния является независимость от времени функции  $U$ , т.е. в стационарном состоянии эта функция однозначно трактуется как потенциальная энергия. В этом случае, подставим во временное уравнение Шрёдингера  $\Psi = \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \left( \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right) + U \cdot \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \\ i\hbar \psi \left( -i\frac{E}{\hbar} \right) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \Delta \psi + U \cdot \psi \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \end{aligned}$$

Т.к.  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \neq 0$ , то можно сократить  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ :  $E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \cdot \psi$ . После преобразований получаем уравнение

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \cdot \psi = 0$$

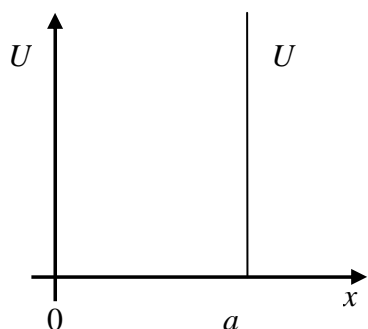
которое носит название *уравнение Шрёдингера для стационарного состояния*.

## Лекции 5 - 6. Стационарные задачи квантовой механики.

*Частица в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Частица в трехмерном прямоугольном потенциальном ящике. Понятие о вырождении энергетических уровней. Одномерный потенциальный порог и барьер. Туннельный эффект. Сканирующий туннельный микроскоп. Гармонический осциллятор.*

## Задача о бесконечно глубокой потенциальной яме.

Частица массы  $m$  находится в ограниченной одномерной области, за пределы которой она проникнуть не может. Внутри области нет потенциальной энергии ( $U=0$ ), а снаружи потенциальная энергия принимает бесконечно большие значения. Поэтому на границе области на частицу действует бесконечно большая возвращающая сила. (Говорят, что стенки ямы непроницаемые для частицы – т.е. частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме).



Математическая постановка задачи

Область  $\Omega = \{x \in \mathbb{R} | 0 < x < a\}$ .

Потенциальная энергия  $U(x) = \begin{cases} 0, & x \in \Omega \\ +\infty, & x \notin \Omega \end{cases}$

Т.к. частица не может выйти из ямы, то волновая функция частицы вне ямы равна нулю  $\Psi(x) = 0$  при  $x \notin \Omega$ .

Следовательно, ввиду непрерывности волновой функции, на границе ямы волновая функция должна обращаться в ноль  $\Psi(0) = 0$  и  $\Psi(a) = 0$ .

Поэтому и координатная часть волновой функции тоже обращается в ноль в граничных точках

$$\psi(0) = 0 \text{ и } \psi(a) = 0.$$

Координатная часть является решением уравнения Шрёдингера для стационарного состояния  $\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U) \cdot \psi = 0$ , которое в одномерном случае для области внутри ямы примет вид

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

Если ввести обозначение  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ , то уравнение  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2 \cdot \psi = 0$  имеет решение в виде

$\psi = A \cdot \sin(kx + \alpha)$ . Для поиска значений постоянных  $A$  и  $\alpha$  поставляем граничные условия.

$\psi(0) = A \cdot \sin(\alpha) = 0$  откуда следует, что можно принять  $\alpha = 0$ .

$\psi(a) = A \cdot \sin(ka) = 0$ . Это значит, что  $ka = n\pi$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$ , т.е.  $k = \frac{n\pi}{a}$

Поэтому решение примет вид  $\psi = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ .

Для поиска значения  $A$  используем условие нормировки  $P(0 < x < a) = \int_0^a |\psi|^2 dx = 1$

Но

$$\int_0^a |\psi|^2 dx = \int_0^a |A|^2 \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = |A|^2 \int_0^a \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} dx = \frac{|A|^2}{2} \left( x - \frac{a}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right) \Bigg|_0^a = \frac{|A|^2}{2} a$$

Поэтому  $|A|^2 = \frac{2}{a}$ . В данной задаче нет комплексных чисел, поэтому можно считать, что число

$A$  является действительным и положительным, т.е.  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ . Тогда  $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ .

Значения энергии частицы определяются из соотношения  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$ , т.е.

$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$  энергия зависит от номера  $n$ . Целое число  $n$ , определяющее значение энергии частицы называется *главным квантовым числом*.

В итоге, любому натуральному числу  $n$  соответствует решение  $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$  и значение энергии  $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$ . Пси-функция  $\Psi_n = \psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ .

Энергия частицы в бесконечно глубокой яме принимает дискретные значения, или, как говорят, *квантуется*.

Случай  $n=0$  не рассматриваем, т.к. при  $n=0$  получаем, что  $\psi_0 = 0$ , т.е. частицы нет в яме. Состояние частицы с минимальным значением энергии ( $n=1$ ) называется *основным состоянием*. Остальные состояния (для  $n>1$ ) – *возбужденными*:  $n=2$  – *первое возбуждённое состояние*,  $n=3$  – *второе возбуждённое состояние* и т.д.

Разность соседних уровней энергии при больших значениях

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n+1)^2 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} n$$

пропорциональна номеру  $n$ .

Для молекулы газа с массой  $m \sim 10^{-27}$  кг в области с размером  $a \sim 0,1$  м эта разность равна  $\Delta E \sim 10^{-38} n$  Дж или  $\Delta E \sim 10^{-19} n$  эВ. Учитывая, что при  $T=300$  К энергия теплового движения порядка  $E_T \sim 10^{-21}$  Дж, то дискретностью уровней энергии частицы можно пренебречь.

Но для электрона  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  в области  $a \sim 10^{-10}$  м (порядок размера атома)  $\Delta E \sim 10^{-17} n$  Дж, что уже соизмеримо со значением тепловой энергии.

*Замечание.* Найдём вектор плотности вероятности для частицы в яме.

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \text{grad} \Psi^* - \Psi^* \text{grad} \Psi).$$

Т.к. задача одномерная, то  $\vec{j} = (j_x, 0, 0)$ , где  $j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)$ .

Из  $\Psi_n = \psi_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$  следует  $j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi_n \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} - \psi_n^* \frac{\partial \psi_n}{\partial x} \right)$ .

Из вещественности решения  $\psi_n = \psi_n^* = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$  следует, что

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi_n \frac{\partial \psi_n^*}{\partial x} - \psi_n^* \frac{\partial \psi_n}{\partial x} \right) = 0$$

Т.е. вероятность нахождения частицы в яме не изменяется с течением времени.

### **Частица в трёхмерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками.**

Частица массы  $m$  находится в трёхмерной области, за пределы которой она проникнуть не может. Внутри области нет потенциальной энергии ( $U=0$ ), а снаружи потенциальная энергия



принимает бесконечно большие значения. Поэтому на границе области на частицу действует бесконечно большая возвращающая сила.

Математическая постановка задачи

Область  $\Omega = \{(x, y, z) | 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c\}$ .

Потенциальная энергия  $U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (x, y, z) \in \Omega \\ +\infty, & (x, y, z) \notin \Omega \end{cases}$ .

Т.к. частица не может выйти из ямы, то волновая функция частицы вне ямы равна нулю  $\Psi(x, y, z) = 0$  при  $(x, y, z) \notin \Omega$ . Следовательно, на границе ямы волновая функция должна обращаться в нуль

$$\Psi(0, y, z) = 0 \text{ и } \Psi(a, y, z) = 0;$$

$$\Psi(x, 0, z) = 0 \text{ и } \Psi(x, b, z) = 0;$$

$$\Psi(x, y, 0) = 0 \text{ и } \Psi(x, y, c) = 0;$$

Поэтому и координатная часть волновой функции тоже обращается в нуль в граничных точках.

Координатная часть является решением уравнения Шрёдингера для стационарного состояния  $\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U) \cdot \Psi = 0$ , которое в трёхмерном случае для области внутри ямы примет вид

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \Psi = 0.$$

Решение ищем в виде произведения трех функций, каждая из которых зависит только от одной из координат  $\Psi = A \cdot X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z)$ . После подстановки

$$A \cdot X''_{xx} \cdot Y \cdot Z + A \cdot X \cdot Y''_{yy} \cdot Z + A \cdot X \cdot Y \cdot Z''_{zz} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot A \cdot X \cdot Y \cdot Z = 0$$

разделим на  $A \cdot X \cdot Y \cdot Z$ . Тогда в полученном уравнении

$$\frac{X''_{xx}}{X} + \frac{Y''_{yy}}{Y} + \frac{Z''_{zz}}{Z} + \frac{2m}{\hbar^2} E = 0.$$

Первые три слагаемые зависят от трёх разных аргументов, но сумма является постоянным числом. Это возможно, если каждое из слагаемых – постоянное число. Например,

$$\frac{X''_{xx}}{X} = -k_1^2, \quad \frac{Y''_{yy}}{Y} = -k_2^2, \quad \frac{Z''_{zz}}{Z} = -k_3^2.$$

Решения этих уравнений должны быть ограниченными, поэтому константы – отрицательные. Исходное уравнение от трех переменных распадается на три одномерных уравнения. Решая их с учётом граничных условий как в предыдущем случае, получаем решения

$$k_1 = \frac{n_1 \pi}{a}, \quad k_2 = \frac{n_2 \pi}{b}, \quad k_3 = \frac{n_3 \pi}{c}.$$

$$X = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right), \quad Y = \sqrt{\frac{2}{b}} \cdot \sin\left(\frac{n_2 \pi}{b} y\right), \quad Z = \sqrt{\frac{2}{c}} \cdot \sin\left(\frac{n_3 \pi}{c} z\right).$$

$$\Psi = \sqrt{\frac{8}{abc}} \cdot \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_2 \pi}{b} y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_3 \pi}{c} z\right).$$

Из равенства  $-k_1^2 - k_2^2 - k_3^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E = 0$  находим выражение для энергии

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right).$$

Откуда видно, что в этом случае тоже энергия принимает дискретные значения.

Предположим, что яма является кубической, т.е.  $a = b = c$ . Тогда из выражения для энергии

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

видно, что возможны случаи, когда одному значению энергии соответствуют различные пси-функции.

**Определение.** Совокупность (различных) состояний, в которых частица имеет одинаковое значение энергии, называется *вырожденным состоянием*. Количество таких состояний (для одного и того же значения энергии) называется *кратностью вырождения* уровня энергии. Если кратность уровня энергии равна единице, то говорят, что уровень энергии *не вырожден*.

**Пример.** Найдём кратность вырождения уровней энергии (с 1-го по 6-й) в кубической потенциальной яме.

Вид пси-функции определяется набором трех натуральных чисел  $(n_1, n_2, n_3)$

$$\Psi = \sqrt{\frac{8}{abc}} \cdot \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_2 \pi}{a} y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_3 \pi}{a} z\right),$$

а значение энергии зависит от «квадрата длины набора»  $(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$ :

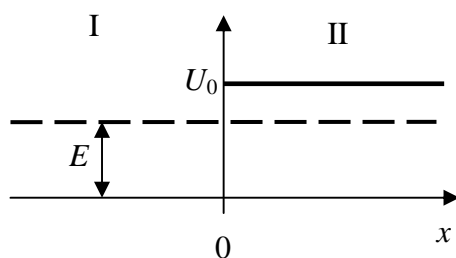
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2).$$

Значения энергии упорядочиваем по величине.

Кратность вырождения равна числу наборов «одной длины».

№	Наборы чисел $(n_1, n_2, n_3)$	Значение энергии	Кратность вырождения
1	(1,1,1)	$E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$	1
2	(2,1,1), (1,2,1), (1,1,2)	$E_2 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$	3
3	(2,2,1), (1,2,2), (2,1,2)	$E_3 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$	3
4	(3,1,1), (1,3,1), (1,1,3)	$E_4 = \frac{11\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$	3
5	(2,2,2)	$E_5 = \frac{6\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$	1
6	(1,2,3), (2,1,3), (1,3,2), (3,1,2), (3,2,1), (2,3,1)	$E_6 = \frac{7\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$	6

### Падение частицы на потенциальный порог.



1. Частица массы  $m$  с энергией  $E$  движется вдоль оси  $X$ , сначала в области I, где потенциальная энергия меньше энергии частицы, и налетает на область II, в которой потенциальная энергия больше энергии частицы  $U_0 > E$ . Для области I пусть  $x < 0$ , а для области II  $x > 0$ . Примем зависимость потенциальной энергии в виде

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния в области I:

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

Соответственно, решение  $\psi_I = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}$ , где  $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ .

В области I решение является суперпозицией *падающей* на порог и *отраженной* от порога волн:

$$\psi_I = \psi_I^{ПАД} + \psi_I^{ОТР}.$$

Т.к. уравнение падающей (в положительном направлении оси X) на преграду волны де Бройля должно иметь вид

$$\psi_I^{ПАД} = C_1 \cdot e^{-i\left(\frac{E_{п.т}}{\hbar} - k_1 x\right)} = C_1 \cdot e^{ik_1 x} \cdot e^{-i\frac{E_{п.т}}{\hbar} t},$$

то в решении для области I падающей волне соответствует координатная часть  $\psi_I^{ПАД} = C_1 e^{ik_1 x}$ .

Соответственно, отражённую волну де Бройля описывает  $\psi_I^{ОТР} = C_2 e^{-ik_1 x}$ .

Для области II:

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \cdot \psi_{II} = 0$$

решение имеет вид  $\psi_{II} = C_3 e^{-k_2 x} + C_4 e^{k_2 x}$ , где  $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$ .

Оставляем только решение, убывающее при  $x \rightarrow +\infty$ . (Этому соответствует условие того, что вероятность нахождения частицы внутри барьера убывает с глубиной.) Поэтому прошедшая волна  $\psi_{II}^{ПРОШ} = C_3 e^{-k_2 x}$ .

Граничным условием является непрерывность функции  $\psi$  и её первой производной  $\psi'_x$  на границе барьера

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad \frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0).$$

откуда получаем систему для определения коэффициентов  $\begin{cases} C_1 + C_2 = C_3 \\ ik_1 C_1 - ik_1 C_2 = -k_2 C_3 \end{cases}$ .

Решение этой системы имеет вид  $C_2 = \frac{(k_2 + ik_1)}{(ik_1 - k_2)} C_1$ ,  $C_3 = \frac{2ik_1}{(ik_1 - k_2)} C_1$ .

*Эффективной глубиной*  $L$  проникновения частицы в область порога называется расстояние от границы порога, на котором плотности вероятности уменьшается в  $e$  раз.

$$\frac{|\psi_{II}^{ПРОШ}(0)|^2}{|\psi_{II}^{ПРОШ}(L)|^2} = \frac{|C_3|^2}{|C_3 e^{-k_2 L}|^2} = e$$

$$e^{2k_2 L} = e, \quad 2k_2 L = 1, \quad L = \frac{1}{2k_2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(U_0 - E)}}.$$

Замечание. Из последней формулы следует, что при увеличении «высоты» порога  $U_0 \rightarrow \infty$  эффективная глубина уменьшается  $L \rightarrow 0$ .

Найдём плотность потока вероятности падающей волны

$$\begin{aligned} j_x^{ПАД} &= \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^{ПАД} \frac{\partial (\psi^{ПАД})^*}{\partial x} - (\psi^{ПАД})^* \frac{\partial \psi^{ПАД}}{\partial x} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left( C_1 e^{ik_1 x} \frac{\partial (C_1 e^{ik_1 x})^*}{\partial x} - (C_1 e^{ik_1 x})^* \frac{\partial (C_1 e^{ik_1 x})}{\partial x} \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (C_1 C_1^* e^{ik_1 x} (-ik_1) e^{-ik_1 x} - (C_1^* C_1 e^{-ik_1 x}) (ik_1) e^{ik_1 x}) = -2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_1|^2 \end{aligned}$$

Плотность потока вероятности отраженной волны

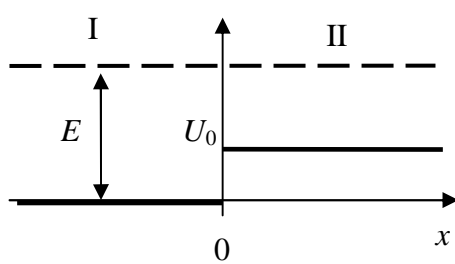
$$j_x^{OTP} = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^{OTP} \frac{\partial (\psi^{OTP})^*}{\partial x} - (\psi^{OTP})^* \frac{\partial \psi^{OTP}}{\partial x} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left( C_2 e^{-ik_1 x} \frac{\partial (C_2 e^{-ik_1 x})^*}{\partial x} - (C_2 e^{-ik_1 x})^* \frac{\partial (C_2 e^{-ik_1 x})}{\partial x} \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} (C_2 C_2^* e^{-ik_1 x} i k_1 e^{ik_1 x} - (C_2^* C_2 e^{ik_1 x}) (-ik_1) (e^{-ik_1 x})) = 2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_2|^2$$

Коэффициент отражения от порога равен  $R = \frac{|\vec{j}^{OTP}|}{|\vec{j}^{ПАД}|} = \frac{\left| 2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_2|^2 \right|}{\left| 2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_1|^2 \right|} = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2} = \frac{|k_2 + ik_1|^2}{|ik_1 - k_2|^2} = 1$

т.е. частица отражается от порога полностью.

2. Теперь рассмотрим случай, когда энергия частицы больше высоты порога  $E > U_0$ . Пусть опять



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & x > 0 \end{cases}$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния в области I:

$$\frac{d^2 \psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi_I = 0$$

Соответственно, решение  $\psi_I = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}$ , где

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E.$$

В области I решение является суперпозицией *падающей* на барьер и *отраженной* от порога волн:

$$\psi_I = \psi_I^{ПАД} + \psi_I^{OTP}$$

для области I падающей волне соответствует координатная часть  $\psi_I^{ПАД} = C_1 e^{ik_1 x}$ , а отражённой  $\psi_I^{OTP} = C_2 e^{-ik_1 x}$ .

Для области II:

$$\frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \cdot \psi_{II} = 0$$

решение имеет вид  $\psi_{II} = C_3 e^{-ik_2 x} + C_4 e^{ik_2 x}$ , где  $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)}$ .

Оставляем только прошедшую волну  $\psi_{II}^{ПРОШ} = C_3 e^{ik_2 x}$ .

Граничным условием является непрерывность функции  $\psi$  и её первой производной  $\psi'_x$  на границе порога

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad \frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0).$$

откуда получаем систему для определения коэффициентов

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_3 \\ k_1 C_1 - k_1 C_2 = k_2 C_3 \end{cases}$$

Решение этой системы имеет вид  $C_2 = \frac{(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)} C_1$ ,  $C_3 = \frac{2k_1}{k_2 + k_1} C_1$ .

Плотность потока вероятности падающей волны  $j_x^{ПАД} = -2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_1|^2$ .

Плотность потока вероятности отраженной волны  $j_x^{OTP} = 2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_2|^2$ .

Плотность потока вероятности прошедшей волны  $j_x^{ПРОШ} = 2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_3|^2$ .

Коэффициент отражения от порога  $R = \frac{|\vec{j}^{ОТР}|}{|\vec{j}^{ПАД}|} = \left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$  не равен нулю!

Это означает, что в отличие от классического случая, когда при  $E > U_0$  частица обязательно преодолит «горку», в квантовой механике существует ненулевая вероятность того, что частица отразится от «горки» при  $E > U_0$ .

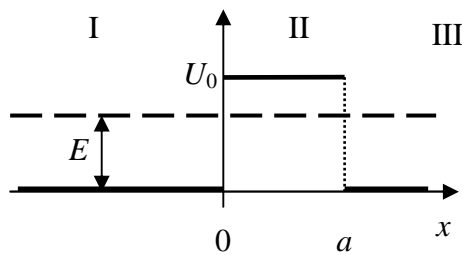
Коэффициент прохождения (прозрачности) порога определяется по аналогии

$$D = \frac{|\vec{j}^{ПРОШ}|}{|\vec{j}^{ПАД}|} = \left| \frac{C_3}{C_1} \right|^2 = \left( \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2.$$

В частности, получаем что  $R + D = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 + \left( \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 = 1$ .

Прохождение частицы через потенциальный барьер.

Из результатов п.1 предыдущей задачи следует, что вероятность обнаружения частицы внутри порога при  $E < U_0$  на некотором расстоянии от «ступеньки» не равна нулю. Поэтому возможна ситуация, при которой частица преодолеет конечную область с потенциальной энергией  $U_0$ , хотя энергия частицы меньше  $E < U_0$ .



Частица массы  $m$  с энергией  $E$  движется вдоль оси  $x$ , сначала в области I ( $x < 0$ ), где потенциальная энергия меньше энергии частицы, и налетает на область II, в которой потенциальная энергия больше энергии частицы  $U_0 > E$ . В отличие от предыдущей задачи, будем предполагать, что протяженность области II конечная  $0 < x < a$ . Далее простирается область III ( $x > a$ ), где энергия частицы больше потенциальной энергии. Примем зависи-

мость потенциальной энергии в виде

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 < x < a \\ 0, & x > a \end{cases}$$

Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния в области I:

$$\frac{d^2 \psi_I}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \psi_I = 0$$

Соответственно, решение  $\psi_I = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x}$ , где  $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ .

В области I решение является суперпозицией *падающей* на барьер и *отраженной* от барьера волн:

$$\psi_I = \psi_I^{ПАД} + \psi_I^{ОТР}$$

Для области II:

$$\frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \cdot \psi_{II} = 0$$

решение имеет вид  $\psi_{II} = C_3 e^{-k_2 x} + C_4 e^{k_2 x}$ , где  $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}$ .

В области III

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

Общий вид решения  $\psi_{III} = C_5 e^{ik_1 x} + C_6 e^{-ik_1 x}$ . Отстаиваем только прошедшую волну  $\psi_{III} = C_5 e^{ik_1 x}$ . Граничным условием является непрерывность функции  $\psi$  и её первой производной  $\psi'_x$  на границе барьера

$$\begin{aligned}\psi_I(0) &= \psi_{II}(0), \quad \frac{d\psi_I}{dx}(0) = \frac{d\psi_{II}}{dx}(0), \\ \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a), \quad \frac{d\psi_{II}}{dx}(a) = \frac{d\psi_{III}}{dx}(a).\end{aligned}$$

откуда получаем систему для определения коэффициентов

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_3 + C_4 \\ ik_1 C_1 - ik_1 C_2 = -k_2 C_3 + k_2 C_4 \\ C_3 e^{-k_2 a} + C_4 e^{k_2 a} = C_5 e^{ik_1 a} \\ -k_2 C_3 e^{-k_2 a} + k_2 C_4 e^{k_2 a} = ik_1 C_5 e^{ik_1 a} \end{cases}.$$

Решение этой системы имеет вид  $C_3 = \frac{(k_2 - ik_1) e^{k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$ ,  $C_4 = \frac{(k_2 + ik_1) e^{-k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$

$$2ik_1 C_1 = -(k_2 - ik_1) C_3 + (k_2 + ik_1) C_4 = -(k_2 - ik_1) \frac{(k_2 - ik_1) e^{k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5 + (k_2 + ik_1) \frac{(k_2 + ik_1) e^{-k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$$

$$C_5 = \frac{4ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{\left( (k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a} \right)} C_1$$

$$-2ik_1 C_2 = -(k_2 + ik_1) C_3 + (k_2 - ik_1) C_4 = -(k_2 + ik_1) \frac{(k_2 - ik_1) e^{k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5 + (k_2 - ik_1) \frac{(k_2 + ik_1) e^{-k_2 a} e^{ik_1 a}}{2k_2} C_5$$

$$-2ik_1 C_2 = (e^{-k_2 a} - e^{k_2 a}) \frac{(k_2 - ik_1)(k_2 + ik_1)}{2k_2} e^{ik_1 a} C_5$$

$$C_2 = \frac{(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a})(k_2 - ik_1)(k_2 + ik_1)}{\left( (k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a} \right)} C_1, \quad C_3 = \frac{2ik_1 (k_2 - ik_1) e^{k_2 a}}{\left( (k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a} \right)} C_1$$

$$C_4 = \frac{2ik_1 (k_2 + ik_1) e^{-k_2 a}}{\left( (k_2 + ik_1)^2 e^{-k_2 a} - (k_2 - ik_1)^2 e^{k_2 a} \right)} C_1$$

Плотность потока вероятности падающей волны  $j_x^{ПАД} = -2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_1|^2$ .

Плотность потока вероятности прошедшей волны  $j_x^{ПРОШ} = 2ik_1 \frac{i\hbar}{2m} |C_5|^2$ .

Коэффициент прозрачности барьера

$$\begin{aligned}D &= \frac{|j_x^{ПРОШ}|}{|j_x^{ПАД}|} = \left| \frac{C_5}{C_1} \right|^2 = \left| \frac{4ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{\left( (k_2^2 - k_1^2)(e^{-k_2 a} - e^{k_2 a}) + 2ik_1 k_2 (e^{-k_2 a} + e^{k_2 a}) \right)} \right|^2 = \\ &= \frac{16k_1^2 k_2^2}{\left( (k_2^2 - k_1^2)^2 (e^{-k_2 a} - e^{k_2 a})^2 + 4k_1^2 k_2^2 (e^{-k_2 a} + e^{k_2 a})^2 \right)}\end{aligned}$$

Приблизённо можно считать, что  $D \approx e^{-2k_2 a} \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot a\right)$

Для барьера произвольной формы, заданной в виде функции  $U(x)$ :

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U-E)} dx\right)$$

где интеграл берётся по интервалу  $(x_1, x_2)$ , на котором выполняется неравенство  $U > E$ .

**Определение.** Туннельный эффект или туннелирование - это явление преодоления микрочастицей потенциального барьера в случае, когда её полная энергия (остающаяся при туннелировании неизменной) меньше высоты барьера. Туннельный эффект - явление исключительно квантовой природы, невозможное в классической механике.

**Замечание.** В классической механике энергия частицы равна сумме кинетической и потенциальной энергий  $E = E_k + U$ . В случае если  $E < U$  формально получаем, что  $E_k < 0$ .

Следовательно, в квантовой механике нельзя определить энергию частицы как сумму потенциальной и кинетической. Это выражение справедливо только для *средних* значений.

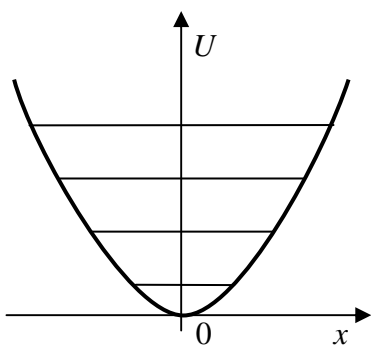
### Квантовый гармонический осциллятор.

Квантовый гармонический осциллятор – это квантовый аналог классической задачи об одномерных колебаниях материальной частицы под действием квазиупругой силы вблизи положения равновесия. В этом случае потенциальную энергию можно выразить через смещение от положения равновесия в виде  $U = \frac{kx^2}{2}$ . Круговая частота колебаний частицы равна  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ,

поэтому выражение для энергии примет вид  $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ .

Квантовый гармонический осциллятор – это одномерная модель колебаний микрочастиц. Эти колебания могут быть вызваны тепловыми движениями или колебаниями под действием внешних электромагнитных волн. В классической механике при колебаниях механическая энергия сохраняется, поэтому в квантовой механике эту задачу рассматриваем как стационарную.

Уравнение Шрёдингера (для стационарного состояния), описывающее квантовый гармонический осциллятор



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

Оказывается, что данное уравнение имеет непрерывные решения только в случае, если энергия частицы выражается в виде

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar\omega.$$

Следовательно, уровни энергии отстоят от друга на одинаковую величину  $\hbar\omega$ , поэтому энергия осциллятора может изменяться только порциями, кратными  $\hbar\omega$ . Число  $n$  определяет уровни энергии, поэтому называется *главным* квантовым числом.

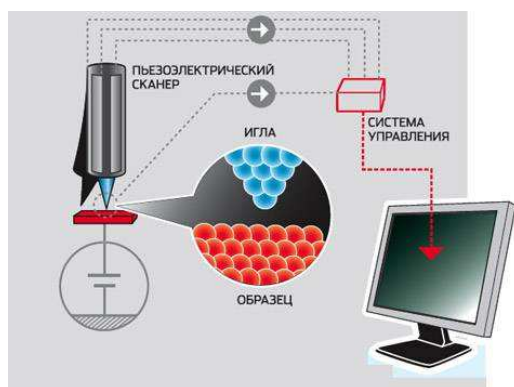
Для квантового осциллятора существует *правило отбора* – энергии меняются так, чтобы главное квантовое число изменялось на единицу  $\Delta n = \pm 1$ .

Существует минимальное значение энергии  $E = \frac{\hbar\omega}{2}$ . Меньше этого значения энергия осциллятора принимать не может.

Таким образом, можно сказать, что модель квантового гармонического осциллятора не противоречит гипотезе Планка о дискретности уровней энергии системы и о существовании квантов.

Наличие минимального значения энергии колебаний системы говорит о том, что всю энергию у системы «отобрать» невозможно. Что в свою очередь, не противоречит теореме Нернста о недостижимости абсолютного нуля температур (как состояния с нулевой энергией колебаний).

### Сканирующий туннельный микроскоп



Рассматривать отдельные атомы можно с помощью устройства, использующего квантовый эффект туннелирования – сканирующий туннельный микроскоп (СТМ). Точнее, сканирующий туннельный микроскоп не рассматривает, а как бы «ощупывает» исследуемую поверхность. Очень тонкая игла-зонд с острием толщиной в один атом перемещается над поверхностью объекта на расстоянии порядка одного нанометра. При этом согласно законам квантовой механики, электроны преодолевают вакуумный барьер между объектом и иглой – туннелируют, и между зондом и образцом начинает течь ток. Сила этого тока

очень сильно зависит от расстояния между концом иглы и поверхностью образца – при изменении зазора на десятые доли нанометра сила тока может возрасти или уменьшиться на порядок. Так что, перемещая зонд вдоль поверхности с помощью пьезоэлементов и отслеживая изменение силы тока, можно исследовать ее рельеф практически «на ощупь».

Создание СТМ стало значительным шагом в освоении наномира. В 1986 году сотрудникам Исследовательского центра компании ИВМ в Цюрихе Герду Биннигу и Генриху Рореру за это достижение была присуждена Нобелевская премия.

СТМ позволяет увидеть детали поверхности с разрешением в сотые и даже тысячные доли нанометра (соответствует увеличению порядка 100 миллионов раз). На самом деле, это графическое изображение того, как меняется зазор между зондом и поверхностью для поддержания постоянного значения тока. Взаимодействие зонда СТМ с электронными оболочками атомов дает возможность изучить самые мельчайшие подробности, доступные на сегодняшний день.



## Лекции 7 - 8. Представление физических величин операторами.

*Операторы координаты, импульса, момента импульса, потенциальной и кинетической энергии. Гамильтониан квантовой системы как оператор полной энергии. Основные постулаты квантовой механики. Вероятностный характер результатов измерений в квантовой механике. Вычисление средних значений физических величин в квантовых системах.*

Как уже было сказано процесс измерения любого параметра, характеризующего состояние системы, изменяет это состояние. Следовательно, меняется и волновая функция. Поэтому любому измерению какой-либо физической величины  $A$  в квантовой механике соответствует оператор, обозначаемый как  $\hat{A}$ , переводящий волновую функцию состояния до измерения  $\Psi$  в волновую функцию состояния после измерения  $\tilde{\Psi}$ , т.е.  $\hat{A}(\Psi) = \tilde{\Psi}$ . Принцип суперпозиции состояний требует, чтобы этот оператор был линейным  $\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2$ .

В квантовой механике любое значение измеряемой физической величины должно являться *собственным значением* оператора данной физической величины, т.е. если при измерении получается значение  $A$ , то существует такая волновая функция  $\Psi'$ , что выполняется соотношение  $\hat{A}(\Psi') = A \cdot \Psi'$ . Эта функция называется *собственной функцией* данного оператора.

Так как измеряемые величины должны быть вещественными, то и все собственные значения данного оператора, соответствующего этой физической величине, должны быть вещественными. Это означает, что оператор должен быть *эрмитовым* (или *комплексно самосопряжённым*.)

Это следует понимать следующим образом. Пары любых комплексно-значных функций  $u$  и  $v$ , заданных в одной области  $V$  можно сопоставить скалярное произведение по следующему правилу  $(u, v) = \int_V v^* \cdot u \cdot dV$  (при условии, что данный интеграл существует).

Аксиомы скалярного произведения выполняются

$$(u, u) = \int_V u^* \cdot u \cdot dV = \int_V |u|^2 \cdot dV \geq 0. \text{ Если } (u, u) = \int_V |u|^2 \cdot dV = 0, \text{ то } u \equiv 0.$$

В комплексном случае условие симметричности скалярного произведения принимает вид

$$(u, v) = \int_V v^* \cdot u \cdot dV = \int_V (u^* \cdot v)^* \cdot dV = (v, u)^*.$$

Для любого числа  $\lambda$  справедливо  $(\lambda u, v) = \lambda(u, v)$  и  $(u, \lambda v) = \lambda^*(u, v)$ .

Линейность по аргументам очевидна.

Оператор  $\hat{B}$  называется *сопряжённым* к оператору  $\hat{A}$  (относительно скалярного произведения) если для любых функций  $u$  и  $v$  выполняется равенство  $(\hat{A}(u), v) = (u, \hat{B}(v))$ . Сопряжённый оператор обозначается  $\hat{B} = \hat{A}^*$ . Оператор называется *самосопряжённым* (или *эрмитовым*) если он совпадает со своим сопряжённым  $\hat{A} = \hat{A}^*$ .

1. Все собственные числа самосопряжённого оператора являются вещественными.

Пусть  $u$  – собственная функция самосопряжённого оператора  $\hat{A}$ . Тогда существует ненулевое число  $A$ , такое, что выполняется равенство  $\hat{A}(u) = A \cdot u$ . Поэтому  $(\hat{A}(u), u) = A \cdot (u, u)$ . Но

$(\hat{A}(u), u) = (u, \hat{A}^*(u)) = (u, \hat{A}(u)) = (u, A \cdot u) = A^* \cdot (u, u)$ . Следовательно,  $A = A^*$  – собственное значение является вещественным.

2. Собственные функции самосопряжённого оператора, отвечающие разным собственным значениям взаимно ортогональны  $(u, v) = 0$ .

Пусть  $\hat{A}(u) = A_1 \cdot u$  и  $\hat{A}(v) = A_2 \cdot v$ . Тогда  $(\hat{A}(u), v) = A_1 \cdot (u, v)$  и

$$(\hat{A}(u), v) = (u, \hat{A}^*(v)) = (u, \hat{A}(v)) = (u, A_2 \cdot v) = A_2^* \cdot (u, v) = A_2 \cdot (u, v)$$

Но т.к.  $A_1 \neq A_2$ , то равенство  $A_1 \cdot (u, v) = A_2 \cdot (u, v)$  выполняется при  $(u, v) = 0$ .

Все собственные значения данного оператора образуют множество, которое называется спектр оператора. Если это множество является отрезком прямой (т.е. образуют континуум), то говорят, что у оператора непрерывный спектр. Если собственные значения образуют дискретное множество, то говорят о дискретном спектре оператора.

При измерениях конкретные значения физической величины получаются с некоторой вероятностью. Поэтому можно определить среднее значение физической величины, получаемое при измерениях в данном состоянии.

Для оператора с дискретным спектром среднее значение соответствующей физической величины определяется соотношением  $\langle A \rangle = \sum_n p_n A_n$ , где  $p_n = p(A_n)$  - вероятность получения значения  $A_n$ .

В большинстве случаев собственные функции самосопряжённого оператора образуют полную систему функций. Это значит, что любую функцию можно представить в виде суммы  $\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$ , где  $\Psi_n$  - все собственные функции, образующие полную систему. (Предполагается, что этот ряд сходится равномерно.) Для поиска коэффициентов разложения следует использовать свойство ортогональности функций. Умножим левую и правую части на  $\Psi_n$

$$(\Psi, \Psi_n) = c_n (\Psi_n, \Psi_n), \quad c_n = \frac{(\Psi, \Psi_n)}{(\Psi_n, \Psi_n)}.$$

Пусть полная система функций ортонормированна, т.е.

$$(\Psi_n, \Psi_m) = 1 \text{ при } n = m \text{ и } (\Psi_n, \Psi_m) = 0 \text{ при } n \neq m.$$

Это условие записывают в виде  $(\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{nm}$ , где символ Кронекера определяют как функцию от двух натуральных чисел

$$\delta(n, m) = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}.$$

При выполнении этих условий получаем, что  $c_n = (\Psi, \Psi_n)$ .

Будем предполагать, что для функции  $\Psi$  выполняется условие нормировки  $\int_V |\Psi|^2 dV = 1$ ,

которое можно переписать в виде  $(\Psi, \Psi) = 1$ . Тогда

$$(\Psi, \Psi) = \left( \sum_n c_n \Psi_n, \sum_m c_m \Psi_m \right) = \sum_m c_n (c_m)^* (\Psi_n, \Psi_m) = \sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Если функцию, нормированную на единицу, разложить в ряд по полной ортонормированной системе собственных функций самосопряжённого оператора физической величины, то квадраты модулей коэффициентов разложения дадут вероятности получения собственных значений, соответствующих данным собственным функциям. Т.е. если  $(\Psi, \Psi) = 1$  и

$(\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{nm}$ , то  $p_n = p(A_n) = |c_n|^2$ , где  $c_n = (\Psi, \Psi_n)$  при выполнении  $\hat{A}(\Psi_n) = A_n \cdot \Psi_n$ . В этом случае среднее значение можно определить равенством

$$\langle A \rangle = \sum_n p_n A_n = \sum_n |c_n|^2 A_n = \sum_m c_n (c_m)^* (\Psi_n, \Psi_m) A_n = \left( \sum_n A_n c_n \Psi_n, \sum_m c_m \Psi_m \right) = (\hat{A}(\Psi), \Psi).$$

Если оператор имеет непрерывный спектр, то среднее значение соответствующей физической величины определяется аналогично

$$\langle A \rangle = (\hat{A}(\Psi), \Psi) = \int_V \Psi^* \hat{A}(\Psi) dV.$$

Следовательно, если функция  $\Psi$ , описывающая состояние системы является собственной для данного оператора  $\hat{A}$ , то при измерении мы получаем пропорциональную функцию  $\tilde{\Psi} = A \cdot \Psi$ , которая «теряет условие нормировки на единицу»  $\int_V |\tilde{\Psi}|^2 dV = \int_V |A \cdot \Psi|^2 dV = A^2$ . Т.е. можно считать,

что состояние системы не меняется. Очевидно, что вероятность получения результата  $A$  при измерениях в этой ситуации равна 1. И среднее значение совпадает с результатом  $\langle A \rangle = A$ .

Если в каком-то состоянии, определяемом функцией  $\Psi$  надо измерить одновременно две физические величины  $A$  и  $B$ , то согласно общим правилам измерений надо подействовать соответствующими операторами  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  на пси-функцию данного состояния. Если эта функция является собственной одновременно для обоих операторов, то состояние системы не изменится и вероятность получения обоих результатов равна единице. Говорят, что в этом случае *две величины одновременно могут быть измерены с сколь угодно точностью*. В этом случае результаты измерений не зависят от порядка их проведения, т.к.  $\hat{A}(\hat{B}(\Psi)) = \hat{B}(\hat{A}(\Psi))$ .

В общем случае каждое измерение меняет состояние системы, поэтому результаты будут зависеть от порядка измерений  $\hat{A}(\hat{B}(\Psi)) \neq \hat{B}(\hat{A}(\Psi))$ .

Коммутатором двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  называется оператор  $[\hat{A}, \hat{B}]$ , определяемый соотношением  $[\hat{A}, \hat{B}](\Psi) = \hat{A}(\hat{B}(\Psi)) - \hat{B}(\hat{A}(\Psi))$ .

Смысл этого определения можно уяснить, если переписать определение в другом виде

$$\hat{A}(\hat{B}(\Psi)) = \hat{B}(\hat{A}(\Psi)) + [\hat{A}, \hat{B}](\Psi).$$

Т.е. коммутатор – это добавочный оператор, позволяющий переставлять порядок операторов.

Если для двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  их коммутатор является нулевым оператором  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{0}$ , то говорят, что эти операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  перестановочны или *коммутируют* друг с другом.

Оказывается, что если для операторов двух величин  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  выполняется соотношение  $[\hat{A}, \hat{B}] = i \cdot \hat{K}$ , где  $\hat{K}$  - оператор некоторой величины, то для неопределённостей этих величин

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle K \rangle|}{2}.$$

Как известно, две физические величины могут быть одновременно измерены со сколь угодно точностью только в случае, если они канонически не сопряжены  $\Delta A \cdot \Delta B = 0$ . Поэтому для них должно быть  $|\langle K \rangle| = 0$ , т.е.  $\hat{K} = \hat{0}$  (нулевой оператор). Это значит, что *две величины одновременно могут быть измерены с сколь угодно точностью, если их операторы коммутируют, т.е. их коммутатор является нулевым оператором*.

#### Операторы квантовой механики.

1. Операторы координаты определяются действием на функции

$$\hat{x}(\Psi) = x \cdot \Psi, \quad \hat{y}(\Psi) = y \cdot \Psi, \quad \hat{z}(\Psi) = z \cdot \Psi.$$

Все три оператора перестановочны между собой. Например,

$$\text{коммутатор } [\hat{x}, \hat{y}](\Psi) = \hat{x}(\hat{y}(\Psi)) - \hat{y}(\hat{x}(\Psi)) = x \cdot y \cdot \Psi - y \cdot x \cdot \Psi = 0, \text{ т.е. } [\hat{x}, \hat{y}] = \hat{0}.$$

Следовательно, координаты могут быть одновременно измерены с любой точностью.

Оператор координаты является самосопряженным. Проверим это, например, для  $\hat{x}$ :

$$\begin{aligned}
 (\hat{x}(\Psi_1), \Psi_2) &= \int_V \Psi_2^* \cdot \hat{x}(\Psi_1) \cdot dV = \int_V \Psi_2^* \cdot x \cdot \Psi_1 \cdot dV = \int_V \Psi_2^* \cdot x^* \cdot \Psi_1 \cdot dV = \\
 &= \int_V (x\Psi_2)^* \cdot \Psi_1 \cdot dV = (\Psi_1, \hat{x}(\Psi_2))
 \end{aligned}$$

Собственные числа этого оператора – это значения координат. Очевидно, что эти значения – действительные числа. Оператор координаты обладает непрерывным спектром, поэтому среднее значение, например, координаты  $x$  определяется равенством

$$\langle x \rangle = \int_V \Psi^* \hat{x}(\Psi) dV = \int_V \Psi^* x \Psi dV = \int_V x |\Psi|^2 dV.$$

Оператор радиус-вектора определяется как векторная функция

$$\vec{R}(\Psi) = \vec{e}_x \hat{x}(\Psi) + \vec{e}_y \hat{y}(\Psi) + \vec{e}_z \hat{z}(\Psi) = x \cdot \Psi \cdot \vec{e}_x + y \cdot \Psi \cdot \vec{e}_y + z \cdot \Psi \cdot \vec{e}_z$$

где  $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$  – орты декартовой системы координат.

2. Оператор проекции импульса на ось декартовой системы координат

$$\hat{p}_x(\Psi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x}, \quad \hat{p}_y(\Psi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad \hat{p}_z(\Psi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z}.$$

Проверим, что этот оператор самосопряженный для одномерного случая. Т.к. частица находится в ограниченной области, то на границе области волновая функция частицы обязательно обращается в ноль. Если область задана интервалом  $a < x < b$ , то  $\Psi(a) = 0$  и  $\Psi(b) = 0$

$$\begin{aligned}
 (\hat{p}_x(\Psi_1), \Psi_2) &= \int_a^b \Psi_2^* \cdot \hat{p}_x(\Psi_1) \cdot dx = \int_a^b \Psi_2^* \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \cdot dx = \frac{\hbar}{i} \int_a^b \Psi_2^* \cdot \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} \cdot dx = \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left\{ \cancel{\int_a^b \Psi_2^* \cdot \Psi_1 \cdot dx} - \int_a^b \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial x} \cdot \Psi_1 \cdot dx \right\} = \int_a^b \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_2^*}{\partial x} \right) \cdot \Psi_1 \cdot dx = \int_a^b \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} \right)^* \cdot \Psi_1 \cdot dx = (\Psi_1, \hat{p}_x(\Psi_2))
 \end{aligned}$$

Собственные значения оператора проекции импульса – это значения проекции импульса. Найдём, например, собственные функции оператора проекции импульса на ось  $X$ . Для этого надо разрешить операторное уравнение  $\hat{p}_x(\Psi) = p_x \cdot \Psi$ . С учётом определения оператора получаем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \cdot \Psi,$$

которое решаем методом разделения переменных  $\frac{d\Psi}{\Psi} = i \frac{p_x}{\hbar} \cdot dx$ , откуда  $\Psi = C \cdot e^{\frac{i p_x \cdot x}{\hbar}}$ , где  $C$  не зависит от  $x$ .

Коммутатор операторов проекций импульса на разные координатные оси

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y](\Psi) = \hat{p}_x(\hat{p}_y(\Psi)) - \hat{p}_y(\hat{p}_x(\Psi)) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = 0.$$

Т.е. координаты импульсов могут быть измерены одновременно с произвольной точностью.

Найдём коммутатор оператора координаты и проекции импульса на одну и ту же ось

$$[\hat{p}_x, \hat{x}](\Psi) = \hat{p}_x(\hat{x}(\Psi)) - \hat{x}(\hat{p}_x(\Psi)) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi) - x \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \Psi + x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \Psi.$$

Таким образом,  $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar \cdot \hat{I}$ , где  $\hat{I}$  – единичный оператор, т.е.  $\hat{I}(\Psi) = \Psi$ .

С учётом того, что  $|\langle \hat{I} \rangle| = 1$  для импульса вдоль оси  $X$  и координаты  $x$  можно написать соотношение  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ . Т.е. эти величины являются канонически сопряжёнными.

Найдём коммутатор оператора координаты и проекции импульса на *разные* оси

$$[\hat{p}_x, \hat{y}](\Psi) = \hat{p}_x(\hat{y}(\Psi)) - \hat{y}(\hat{p}_x(\Psi)) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(y \cdot \Psi) - y \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = 0.$$

Т.е. эти величины не являются канонически сопряжёнными.

Оператор вектора импульса

$$\hat{\vec{p}}(\Psi) = \vec{e}_x \hat{p}_x(\Psi) + \vec{e}_y \hat{p}_y(\Psi) + \vec{e}_z \hat{p}_z(\Psi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \vec{e}_z = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi,$$

где оператор «набла» в декартовых координатах задаётся в виде  $\vec{\nabla} \Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial \Psi}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial \Psi}{\partial z} \vec{e}_z$ .

В квантовой механике вводят оператор *полной энергии*  $\hat{E}$ , такой, что изменение волновой функции во времени (или как говорят *эволюция*) полностью определяется этим оператором:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{E}(\Psi).$$

Собственные значения оператора полной энергии – это значения энергии системы:

$\hat{E}(\Psi) = E \cdot \Psi$ . Найдём вид собственных функций для оператора полной энергии.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \cdot \Psi, \quad \frac{d\Psi}{\Psi} = -i \frac{E}{\hbar} \cdot dt, \quad \Psi = \psi \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t}, \text{ где } \psi - \text{ функция, не зависящая от времени.}$$

Если энергия системы не меняется (стационарное состояние), то волновая функция имеет вид

$$\Psi = \psi \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t}.$$

### Построение операторов квантовой механики

Для построения оператора квантовой механики, соответствующей некоторой динамической переменной в классической механике, следует сначала записать классическое выражение этой величины через импульс и координаты, а затем заменить импульс и координату соответствующими операторами.

### 3. Оператор момента импульса.

В классической физике вектор момента импульса относительно некоторой точки определяется

$$\text{выражением } \vec{L} = \vec{R} \times \vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} = \vec{e}_x (yp_z - zp_y) + \vec{e}_y (zp_x - xp_z) + \vec{e}_z (xp_y - yp_x),$$

где  $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$  - орты декартовой системы координат.

Тогда вектор-оператор момента импульса должен принять вид

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{R}} \times \hat{\vec{p}} = \vec{e}_x (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) + \vec{e}_y (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) + \vec{e}_z (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x).$$

Операторы проекций моментов импульса на оси

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x.$$

*Замечание.* Т.к. операторы проекции импульса на ось и координаты на *другую* ось коммутируют друг с другом, то в последних трёх равенствах их порядок не влияет на результат.

Рассмотрим, например, коммутатор

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y](\Psi) &= \hat{L}_x(\hat{L}_y(\Psi)) - \hat{L}_y(\hat{L}_x(\Psi)) = (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\Psi) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\Psi) = \\ &= \left( y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \left( z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = \\ &= -y\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial z} - yz\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial x} + yx\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + z^2\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x} - zx\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial z} + zy\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial z} - zz\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} - xy\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \end{aligned}$$

$$+x\hbar^2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + zx\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial y} = y \frac{\hbar}{i} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = \frac{\hbar}{i} (\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_y)(\Psi) = -\frac{\hbar}{i} \hat{L}_z(\Psi)$$

Т.е. проекции импульса на разные оси не могут быть измерены одновременно с произвольной точностью.

Запишем оператор проекции момента импульса на ось z, т.е.  $\hat{L}_z$ , в цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$ :  $x = r \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \varphi$ . Откуда  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $\varphi = \arctg \frac{y}{x}$ .

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \cos \varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} = \sin \varphi,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \frac{y}{x^2} = -\frac{\sin \varphi}{r}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \frac{1}{x} = \frac{\cos \varphi}{r}.$$

Выразим производные

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \cos \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \sin \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi}.$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z(\Psi) &= \hat{x}(\hat{p}_y(\Psi)) - \hat{y}(\hat{p}_x(\Psi)) = x \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) - y \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{i} \left\{ r \cos \varphi \left( \sin \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{\cos \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right) - r \sin \varphi \left( \cos \varphi \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right) \right\} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

Собственные значения оператора проекции импульса на ось – это величины проекции момента импульса  $\hat{L}_z(\Psi) = L_z \cdot \Psi$ . Найдем вид собственных функций, отвечающих этим собственным значениям:  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} = L_z \cdot \Psi$ , откуда  $\Psi = C \cdot e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi}$  (где  $C$  – функция, не зависящая от  $\varphi$ ).

Учитывая, что при повороте вокруг оси z на угол  $2\pi m$  ( $m$  – целое число) вид функции не меняется, получаем равенство  $\frac{L_z}{\hbar} = m$ , т.е. проекция момента импульса на ось z может принимать значения, кратные приведённой постоянной Планка  $\hbar$ :  $L_z = m \cdot \hbar$ . В этом смысле постоянную Планка иногда называют *квантом действия*.

#### 4. Оператор потенциальной энергии

В классической механике потенциальная энергия зависит от взаимного положения тел.

Выражение для потенциальной энергии квазиупругой силы (вдоль оси X)  $U = \frac{kx^2}{2}$  в операторном виде будет выглядеть так же  $\hat{U}(\Psi) = \frac{k\hat{x}^2}{2}(\Psi) = \frac{k}{2} \hat{x}(\hat{x}(\Psi)) = \frac{k}{2} x \cdot x \cdot \Psi = \frac{kx^2}{2} \cdot \Psi$ .

Выражение для потенциальной энергии кулоновского взаимодействия двух точечных зарядов  $U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 \cdot q_2}{R}$  перейдет в оператор такого же вида  $\hat{U}(\Psi) = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{\hat{1}}{R} \right)(\Psi)$ , где оператор

$\left( \frac{\hat{1}}{R} \right)$  является обратным к оператору  $\hat{R}(\Psi) = R \cdot \Psi$ . Очевидно, что  $\left( \frac{\hat{1}}{R} \right)(\Psi) = \frac{1}{R} \cdot \Psi$ , поэтому

$$\hat{U}(\Psi) = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 R} \cdot \Psi$$

### 5. Оператор кинетической энергии.

В классической механике кинетическая энергия тела определяется выражением

$E_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$ . Поэтому оператор кинетической энергии имеет вид

$$\hat{E}_K(\Psi) = \frac{\hat{p}^2}{2m}(\Psi) = \frac{1}{2m} \hat{p}(\hat{p}(\Psi)) = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}(\Psi) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2(\Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi.$$

Найдём собственные значения оператора кинетической энергии для одномерного случая

$\hat{E}_K(\Psi) = E_K \cdot \Psi$  или  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E_K \cdot \Psi$ . Получаем уравнение, с которым уже встречались в за-

даче об одномерной яме с непроницаемыми стенками  $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_K \cdot \Psi = 0$ .

Откуда  $\Psi = C \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_K}}{\hbar} x + \alpha\right)$ .

### 6. Оператор Гамильтона.

В классической механике механическая энергия тела, записанная как функция импульса и координат, называется *функцией Гамильтона*  $H = E_K + U = \frac{p^2}{2m} + U$ .

В квантовой механике соответствующий оператор называется оператором Гамильтона (или *гамильтонианом*)

$$\hat{H}(\Psi) = \frac{\hat{p}^2}{2m}(\Psi) + \hat{U}(\Psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi.$$

Уравнение Шрёдингера.

Если рассматривать *нерелятивистские* частицы, то их полную энергию можно определять формулой  $H = E_K + U = \frac{p^2}{2m} + U$ . Поэтому оператор полной энергии в нерелятивистском случае совпадает с оператором Гамильтона  $\hat{E}(\Psi) = \hat{H}(\Psi)$ . Поставляя это равенство в уравнение эволюции волновой функции  $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{E}(\Psi)$ , получаем временное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \cdot \Psi.$$

Таким образом, временное уравнение Шрёдингера описывает *нерелятивистские частицы*.

*Замечание.* Если рассматривать релятивистские частицы, то их полная энергия связана с импульсом соотношением  $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ . Поэтому соответствующее операторное равенство примет вид  $\hat{E}^2(\Psi) = c^2 \hat{p}^2(\Psi) + m_0^2 c^4 \cdot \Psi$ . Но  $\hat{E}^2(\Psi) = \hat{E}(\hat{E}(\Psi)) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$ ,

$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta \Psi$ . В итоге получается уравнение  $\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = c^2 \hbar^2 \Delta \Psi - m_0^2 c^4 \cdot \Psi$ , которое описывает

свободные релятивистские частицы (с целым спином) и носит название *уравнения Гордона-Фока*.

Если попытаться записать *линейную* связь между энергией и импульсом для релятивистского случая в виде  $E = c\sigma_x p_x + c\sigma_y p_y + c\sigma_z p_z + \sigma_0 m_0 c^2$ , так, чтобы выполнялось равенство

$(c\sigma_x p_x + c\sigma_y p_y + c\sigma_z p_z + \sigma_0 m_0 c^2)^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ , то после подстановки в уравнение эволюции волновой функции получится *уравнение Дирака*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sigma_x c \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \sigma_y c \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \sigma_z c \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \sigma_0 m_0 c^2 \Psi.$$

В этом уравнении  $\sigma_0, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  – специальные матричные операторы (4x4), а  $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4)$  – вектор-функция.

**Пример.** В момент времени  $t=0$  волновая функция частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет вид

$$\Psi(x) = A \cdot \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right).$$

Считая, что масса частицы равна  $m_0$ , найдите среднюю кинетическую энергию частицы в данном состоянии. Укажите, суперпозицией каких состояний частицы в потенциальной яме является данное состояние. Найдите волновую функцию  $\Psi(x, t)$ .

**Решение.** В одномерной яме с непроницаемыми стенками как стационарной задаче, волновые функции частицы имеет вид

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}, \text{ где } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2.$$

При  $t=0$  получаем, соответственно,  $\Psi_n(x, 0) = \psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

Воспользуемся формулой Эйлера  $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$ , откуда  $\cos \alpha = \frac{e^{i\alpha} + e^{-i\alpha}}{2}$ ,

$\sin \alpha = \frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2i}$ . Тогда

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= A \cdot \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) = A \cdot \frac{e^{i\frac{3\pi x}{2a}} + e^{-i\frac{3\pi x}{2a}}}{2} \cdot \frac{e^{i\frac{\pi x}{2a}} - e^{-i\frac{\pi x}{2a}}}{2i} = \frac{A}{2} \cdot \frac{e^{i\frac{2\pi x}{a}} - e^{-i\frac{2\pi x}{a}} - \left(e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}}\right)}{2i} = \\ &= \frac{A}{2} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) \end{aligned}$$

Нормируем функцию  $\psi$  на единицу

$$\begin{aligned} \int_0^a |\Psi(x)|^2 dx &= \frac{|A|^2}{4} \cdot \int_0^a \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right)^2 dx = \\ &= \frac{|A|^2}{4} \cdot \left\{ \int_0^a \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx - 2 \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx + \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right\} = 1 \end{aligned}$$

Теперь воспользуемся тем, что  $\int_0^a \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{s\pi x}{a}\right) dx = 0$  при  $k \neq s$  и  $\int_0^a \sin^2\left(\frac{k\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{2}$

для  $k > 0$ . Поэтому  $\int_0^a |\Psi(x)|^2 dx = \frac{|A|^2}{4} \cdot \left\{ \frac{a}{2} + \frac{a}{2} \right\} = 1$ , откуда  $|A| = \frac{2}{\sqrt{a}}$ , т.е. множитель можно взять

в виде  $A = \frac{2}{\sqrt{a}}$ . В итоге получаем

$$\Psi(x) = A \cdot \cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right)$$

Т.к. система функций  $\psi_n$  ортонормированная и функция  $\psi$  нормирована на единицу, то ищем коэффициенты разложения



$$c_n = (\Psi, \Psi_n) = \int_0^a \Psi_n^* \Psi dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) dx$$

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx - \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right\}$$

$$\text{откуда } c_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{a}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}, c_2 = -\sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{a}{2} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ остальные } c_n = 0.$$

Т.е. вероятность обнаружения частицы в основном состоянии ( $n=1$ ) равна  $p_1 = |c_1|^2 = \frac{1}{2}$  и в первом возбуждённом состоянии  $p_2 = |c_2|^2 = \frac{1}{2}$ .

$$\text{Поэтому } \Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} - \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t},$$

где

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, E_2 = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2}.$$

Т.к. энергия частицы в этом состоянии не определена однозначно, то данное состояние не является стационарным.

Найдём среднюю кинетическую энергию

$$\langle E_K \rangle = p_1 E_1 + p_2 E_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{2\hbar^2 \pi^2}{ma^2} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{4ma^2}.$$

Найдём среднее значение кинетической энергии другим способом – прямым вычислением по формуле

$$\begin{aligned} \langle E_K \rangle &= \int_V \Psi^* \hat{E}_K (\Psi) dV = \int_0^a \Psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right) dx = \\ &= \int_0^a \left( \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) \right) \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{a}} \cdot \left( \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) - \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) \right) dx = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a} \frac{a}{2} \left( \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \right) = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{4ma^2} \end{aligned}$$

## Лекции 9 - 10. Квантовая теория атома.

*Ядерная модель атома. Постулаты Н. Бора. Стационарное уравнение Шредингера для атома водорода. Волновые функции и квантовые числа. Спектр атома водорода. Правила отбора для квантовых чисел. Ширина спектральных линий.*

## Модель атома Томсона.

Джозеф Джон Томсон, открывший в 1897 г. электрон, предложил рассматривать атом как положительный однородно заряженный шар, внутри которого движутся отрицательно заряженные электроны.

Найдём собственную частоту колебаний одиночного электрона в такой модели атома.

Уравнение движения электрона  $m\vec{a} = -e\vec{E}$ . Напряжённость электрического поля можно найти по теореме Гаусса

$$\oiint_S (\vec{E}, d\vec{S}) = \frac{1}{\epsilon_0} \iiint_V \rho dV.$$

Считая, что электрический заряд равномерно распределён по объёму, можно найти плотность заряда  $\rho = \frac{q}{V} = \frac{q}{\frac{4}{3}\pi R^3}$ . Выбирая в качестве поверхности  $S$  концентрическую сферу радиуса  $r < R$ ,

получаем

$$E 4\pi r^2 = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{q}{\frac{4}{3}\pi R^3} \frac{4}{3}\pi r^3.$$

Откуда  $E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{R^3} r$ , поэтому уравнение движения примет вид  $ma = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qe}{R^3} r$ . Циклическая

частота колебаний равна  $\omega = \sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qe}{mR^3}}$ . Указанная величина по порядку совпадает с частотами излучения атомов.

## Модель атома Резерфорда.

В 1911 г. Эрнест Резерфорд провел опыты по рассеянию  $\alpha$ -частиц (ядер атомов гелия) на атомах золота. Результаты распределения частиц по углам рассеяния показали, что положительно заряженная область занимает небольшую часть объема атома. На основании чего Резерфорд предложил планетарную модель атома, в которой атом состоит из положительно заряженного тяжёлого ядра, размер которого много меньше размера атома. Вокруг тяжёлого ядра вращаются лёгкие отрицательно заряженные электроны, подобно планетам солнечной системы. Поэтому такую модель называют *планетарной* моделью атома.

Эта модель не может существовать с точки зрения классической электродинамики. При вращательном движении электрон движется с (центростремительным) ускорением, поэтому атом должен непрерывно излучать энергию, что должно привести к потере энергии атомом. Т.е. с классической точки зрения атом является нестабильной системой, т.к. после исчерпания энергии электрон должен упасть на ядро.

## Теория Бора

Попытку снять это противоречие предпринял Нильс Бор в 1913 г. Для этого он предположил, что существуют состояния атома, в которых электрон движется по определённым орбитам, не излучая электромагнитные волны. Такие состояния он назвал *стационарными*. При переходе из одного стационарного состояния в другое атом излучает или поглощает квант энергии

$$\hbar\omega = E_k - E_n.$$

Эти предположения получили название *постулаты Бора*.

В теории Бора возможны только такие орбиты, для которых момент импульса электрона кратен постоянной  $\hbar$ :  $L = n \cdot \hbar$ .

Учитывая, что в этой модели орбиты являются круговыми, поэтому для момента импульса электрона можно записать выражение  $L = p \cdot R$ , получаем, что условие  $p \cdot R = n \cdot \hbar$  эквива-

лентно  $p \cdot 2\pi \cdot R = n \cdot 2\pi \cdot \hbar$ , т.е.  $\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{2\pi R}{n}$  - на орбите укладывается целое число длин волн

де Бройля для электрона.

Спектр излучения атома водорода к тому времени уже был достаточно хорошо изучен. Для циклической частоты излучения опытные данные давали (обобщенную) формулу Бальмера

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

Где  $R$  – постоянная Ридберга,  $n, k$  – натуральные числа,  $k > n$ .

К достоинствам модели атома Бора можно отнести тот факт, что эта модель позволила объяснить, в частности, эту формулу.

Рассмотрим модель атома, в котором лёгкий электрон движется по круговой орбите вокруг тяжёлого положительно заряженного ядра ( $Z$  – зарядовое число)

$$\begin{cases} ma_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R^2} \\ mvR = n\hbar \end{cases} \text{ или } \begin{cases} m \frac{v^2}{R} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R^2} \\ mvR = n\hbar \end{cases}, \begin{cases} mv^2 R = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \\ mvR = n\hbar \end{cases}.$$

Откуда для скорости получаем  $v = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}$ , и радиус орбиты

$$R = \frac{n\hbar}{mv} = \frac{4\pi\epsilon_0 (n\hbar)^2}{mZe^2}.$$

Полная механическая энергия системы равна сумме кинетической и потенциальной

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R}.$$

Т.к. из уравнения движения следует, что  $mv^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R}$ , то

$$E = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R} = -\frac{1}{2} \frac{mZ^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 (n\hbar)^2}.$$

Следовательно, энергия электрона определяется выражением

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Число  $n$  определяет значение энергии и называется *главным квантовым числом*.

Для атома водорода  $Z=1$ , поэтому  $E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \approx -21,7 \cdot \frac{1}{n^2} \cdot 10^{-19}$  Дж или

$E_n \approx -13,6 \cdot \frac{1}{n^2}$  эВ. Следовательно, для отрыва электрона от атома (ионизации атома) водорода

необходима энергия  $E_i \approx 13,6$  эВ.

Первый *Боровский* радиус

$$R_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

– радиус самой «низкой» орбиты электрона по порядку совпадает со средним размером атома, полученным экспериментально. Первый Боровский радиус соответствует невозбуждённому (основному) состоянию атома.

Состояниям с большей энергией соответствуют большие радиусы орбиты.

Для перехода из одного стационарного состояния в другое энергия кванта излучения

$$\hbar\omega = E_k - E_n = \frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right).$$

Для круговой частоты получаем обобщённую формулу Бальмера  $\omega = R \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right)$ ,

где постоянная Ридберга  $R = \frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3}$ . Стоит отметить, что её значение хорошо согласуется

с экспериментальным значением  $R \approx 2,06 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ .

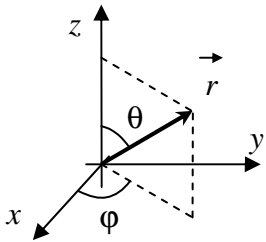
*Замечание.* При излучении или поглощении кванта меняется энергия атома, следовательно, меняется главное квантовое число  $n$ . При изменении главного квантового числа меняется момент импульса атома, следовательно, в соответствии с законом сохранения момента импульса фотон должен иметь момент импульса целочисленно кратный постоянной  $\hbar$ .

Теория Бора, несмотря на успехи в моделировании атома водорода, не помогла построить модель многоэлектронных атомов. Кроме того, она не давала объяснения и другим явлениям, например, тонкой структуре энергетических уровней.

Однако теория Бора уже не была классической теорией строения атома. Одним из важнейших результатов этой теории является демонстрация того факта, что для объяснения явлений микромира необходимы подходы, отличные от подходов классической физики.

Стационарное уравнение Шрёдингера для атома водорода.

Рассмотрим квантовую систему, состоящую из неподвижного ядра с зарядом  $Ze$  ( $Z$  – целое число) и электрона. Такая система при  $Z > 1$  описывает водородоподобный ион, а при  $Z=1$  – атом водорода. Считая энергию системы постоянной, запишем уравнение Шрёдингера для стационарного состояния



$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0.$$

Запишем это уравнение в сферической системе координат,  $x = r \sin \theta \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \theta \sin \varphi$ ,  $z = r \cos \theta$ .

Так как оператор Лапласа в этой системе принимает вид

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

то получаем

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

Перепишем уравнение в виде

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = -\frac{1}{r^2} \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right]$$

Для дальнейшего удобно ввести обозначение

$$\Delta_{\theta, \varphi}(\psi) = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}.$$

Для поиска собственных функций этого оператора необходимо решить уравнение

$$\Delta_{\theta, \varphi}(\psi) = \lambda \psi$$

Исследование этого уравнения показывает, что оно обладает непрерывным решением, если собственное имеет специальный вид число  $\lambda = -l \cdot (l+1)$ , где  $l$  - целое неотрицательное число  $l = 0, 1, 2, \dots$ .

Введём оператор квадрата момента импульса  $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ .

В сферической системе координат этот оператор принимает вид

$$\hat{L}^2(\Psi) = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right\} \text{ или } \hat{L}^2(\Psi) = -\hbar^2 \cdot \Delta_{\theta, \varphi}(\Psi).$$

Поиск собственных значений этого оператора  $\hat{L}^2(\Psi) = L^2 \cdot \Psi$  приводит к уже известному уравнению  $\Delta_{\theta, \varphi}(\Psi) + \frac{L^2}{\hbar^2} \Psi = 0$ , откуда следует равенство  $\lambda = -\frac{L^2}{\hbar^2}$  или  $\frac{L^2}{\hbar^2} = l \cdot (l+1)$  для неотрицательных целых чисел  $l$ . Поэтому величина момента импульса для электрона в атоме принимает значения

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

Т.к. проекция вектора на ось Z не может быть больше длины вектора, то из соотношения  $|L_z| \leq L$  и равенств  $L_z = m\hbar$ ,  $L = \hbar \sqrt{l \cdot (l+1)}$  получаем  $|m\hbar| \leq \hbar \sqrt{l \cdot (l+1)}$  или  $m^2 \leq l \cdot (l+1)$ . С учётом того, что числа  $m$  и  $l$  - целые это соотношение эквивалентно тому, что значения  $m$  находятся в диапазоне  $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ .

Исходное уравнение Шредингера  $\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0$ , в сферической системе координат

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = -\frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}(\psi)$$

с учётом выражения для квадрата момента импульса  $\hat{L}^2(\Psi) = -\hbar^2 \cdot \Delta_{\theta, \varphi}(\Psi)$  может быть записано в форме, учитывающей квадрат момента импульса

$$\hbar^2 r^2 \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi \right) = \hat{L}^2(\psi).$$

Следовательно, решение этого уравнения должно зависеть от величины момента импульса.

Это уравнение имеет непрерывные решения при любых положительных значениях энергии  $E > 0$ . Этому случаю соответствуют решения описывающие электрон, пролетающий мимо ядра.

Для отрицательных значений энергии  $E < 0$  непрерывные решения существуют при

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$ . В этом случае электрон связан с ядром. При этом число  $l$  меняется в диапазоне  $l = 0, 1, \dots, (n-1)$

*Замечание.* Выражение для энергии совпадает с выражением, полученным в теории ядра Бора.

В итоге, можно сказать, что решение уравнения для электрона в водородоподобном атоме определяется тремя целыми числами  $n$ ,  $l$ ,  $m$ , что условно обозначают следующим образом  $\psi = \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ .

Число  $n$  определяет значение электрона в атоме и называется *главным квантовым числом*.

Число  $l$  определяет величину момента импульса электрона, поэтому его называют *орбитальным (азимутальным) квантовым числом*. Оно принимает значения из диапазона

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

Число  $m$  называется *магнитным квантовым числом*. Оно определяет проекцию момента импульса на ось вращения. Принимает значения из диапазона  $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ .

Следовательно, одному значению энергии, задаваемому главным квантовым числом  $n$  может соответствовать несколько разных функций  $\Psi_{n,l,m}$ .

Для заданного значения  $l$  число возможных значений  $m$  равно  $2l + 1$ . Но для заданного числа  $n$  число возможных значений  $l$  равно  $n$ . Поэтому общее количество наборов троек чисел  $(n, l, m)$

равно  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$ . Т.е. кратность вырождения уровня энергии для главного квантового числа  $n$  равна  $n^2$ .

$n$	1	2	3
$\Psi_{n,l,m}$	$\Psi_{1,0,0}$	$\Psi_{2,0,0}, \Psi_{2,1,-1}, \Psi_{2,1,0}, \Psi_{2,1,1}$	$\Psi_{3,0,0}, \Psi_{3,1,-1}, \Psi_{3,1,0}, \Psi_{3,1,1}, \Psi_{3,2,-2}, \Psi_{3,2,-1}, \Psi_{3,2,0}, \Psi_{3,2,1}, \Psi_{3,2,2}$
Кратность вырождения	1	4	9

Для обозначения квантовых состояний вводятся спектроскопические символы.

Значение числа $l$	0	1	2	3	4	5
Обозначение состояния	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$

Например, электрон, находящийся в состоянии с  $l = 0$ , называют  $s$ -электрон, а само состояние –  $s$ -состоянием.

Значение главного квантового числа указывают перед спектроскопическим символом. Например, символ  $3p$  обозначает состояние, в котором  $n=3, l=1$ . Символ  $2s$  обозначает состояние, в котором,  $n=2, l=0$ , и т.д.

В теории Бора изменение состояния электрона соответствует его переходу с одной орбиты на другую. В квантовой механике изменение состояния атома не связано с пространственным перемещением электрона, т.к. понятие орбиты движения электрона становится неприменимым. Например,  $s$ -состояние электрона в классической механике является невозможным, ибо в этом случае орбитальный момент импульса электрона равен нулю – т.е. электрон при своём движении с классической точки зрения проходит через ядро.

#### Правило отбора.

Испускание и поглощение света происходит при переходе атомов из одного состояния в другое. При этом осуществляются такие переходы, у которых изменение главного квантового числа может быть любым, но орбитальное квантовое число меняется только на единицу  $\Delta l = \pm 1$ . Это, например, переходы  $1s \mapsto np$  или  $np \mapsto 1s$ . Это вызвано тем, что фотон обладает собственным моментом импульса, почти равным  $\hbar$ .

Магнитное квантовое число при таких переходах меняется, не больше, чем на единицу  $\Delta m = 0, \pm 1$ .

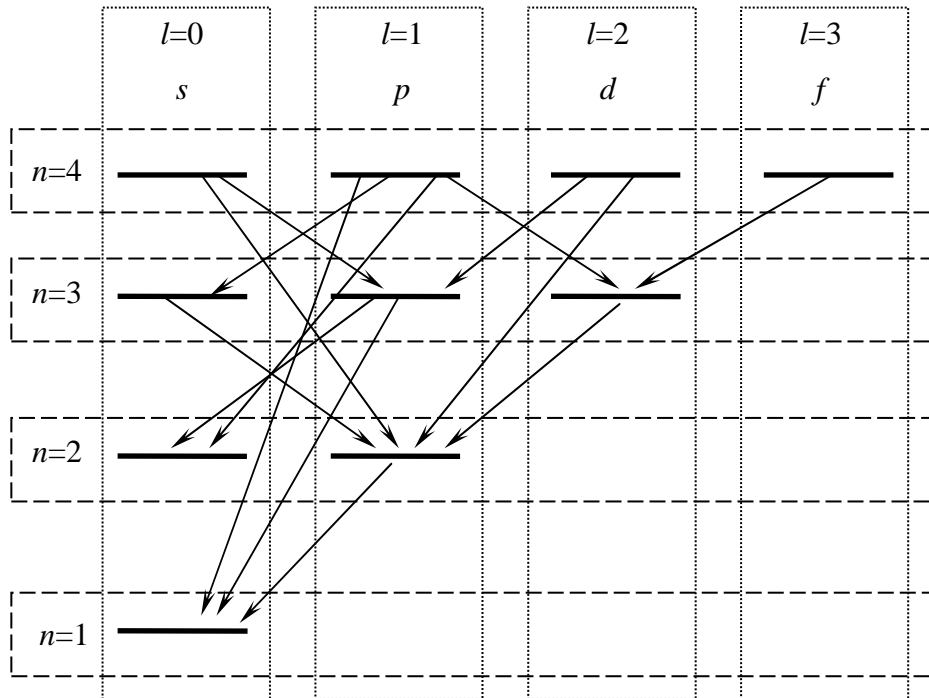
Переходы, которые удовлетворяют правилам отбора, называются разрешенными, вероятность остальных переходов значительно меньше, они трудны для наблюдения и считаются запрещенными.

Состояние  $1s$  – основное. В этом состоянии атом имеет минимальную энергию. Чтобы перевести атом в одно из возбужденных состояний, ему надо сообщить энергию. Это можно осуществить за счет теплового удара (соударения с другим атомом в нагретом газе), за счет электронного удара (например, в электрическом разряде) или за счет поглощения атомом фотона. Характерное время жизни атома в возбужденном состоянии составляет  $10^{-8}$  с. Затем происходит спонтанный переход в состояние с меньшей энергией. Этот переход атома будет сопровождаться излучением кванта с энергией

$$h\nu = E_{\text{НАЧ}} - E_{\text{КОН}},$$

где  $E_{\text{НАЧ}}$  и  $E_{\text{КОН}}$  - энергии соответствующих состояний.

Примеры возможных переходов для атома водорода показаны стрелками на схеме уровней.



Переходы, приводящие к появлению серии Лаймана, можно записать в виде  $np \mapsto 1s$  ( $n = 2, 3, \dots$ ).

Серия Бальмера – это переходы на уровень  $n=2$ :  $np \mapsto 2s$ ,  $ns \mapsto 2p$ ,  $nd \mapsto 2p$ , ( $n = 3, 4, \dots$ ).

Серия Пашена (серия Ритца-Пашена) – это переходы на уровень  $n=3$  и т.д.

В атоме водорода есть состояние, переход из которого запрещен правилами отбора. На схеме уровней видно, что это  $2s$  - состояние. Атом в таком состоянии называют *метастабильным*. Время жизни может быть очень продолжительным. Возбужденный атом водорода в метастабильном состоянии  $2s$  существует  $\sim 2$  мс. Благодаря значительному времени жизни метастабильные атомы могут накапливаться до относительно высоких концентраций  $10^{12} - 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , оставаясь возбужденными. Снятие возбуждений в таких системах происходит вследствие меж-атомных столкновений и может затягиваться на макроскопические времена.

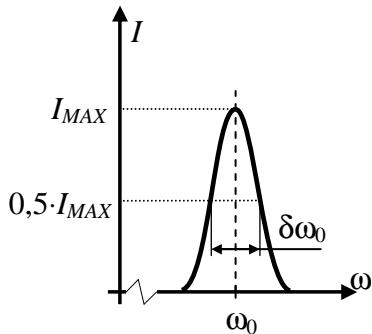
Модель водородоподобного атома удовлетворительно описывает атомы, находящиеся на высоких уровнях энергии возбуждения.

Высоковозбужденные атомы, (когда  $n \gg 1$ ), называют ридберговскими. Для атомов *всех* элементов высоковозбужденные состояния водородоподобны. Причина в том, что при  $n \gg 1$  внешний электрон почти все время удален от иона на очень большие расстояния. Тем самым он движется в поле положительно заряженного атомного остатка (как в водородном атоме вокруг ядра). Отклонения от этой модели заметны только на близких расстояниях от центра. Главная особенность ридберговских состояний – универсальный для всех атомов характер, т.е. все подобные атомы по свойствам схожи. Время жизни этих состояний растет пропорционально  $n^{9/2}$  и может достигать миллисекундных значений и более в зависимости от того, насколько велико главное квантовое число  $n$ .

Оказывается, что газ возбужденных атомов конденсируется, т.к. конденсированное возбужденное состояние энергетически более выгодно по сравнению с газовым (как в металле, электрон не принадлежит отдельному атому).

## Ширина спектральных линий

*Ширина спектральной линии*  $\delta\omega$  - мера немонохроматичности спектральной линии. Её определяют как расстояние между точками контура спектральной линии, в которых интенсивность равна половине её максимального значения. В научной литературе вместо термина «Ширина спектральной линии» иногда используют английскую аббревиатуру FWHM - *Full Width at Half Maximum* (Полная ширина на половине максимума).

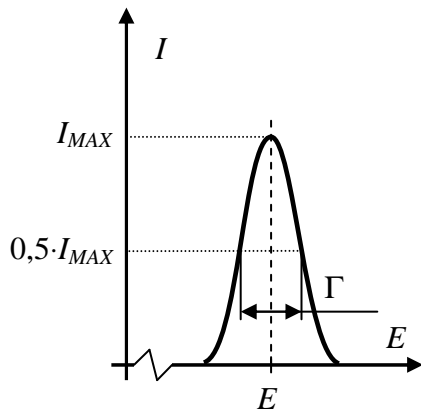


Из возбужденного состояния атом может перейти спонтанно (самопроизвольно) в более низкое энергетическое состояние. Время, за которое число атомов, находящихся в данном возбужденном состоянии, уменьшается в  $e$  раз, называется временем жизни возбужденного состояния  $\tau$ . Время жизни возбужденных состояний атомов имеет порядок  $10^{-8} - 10^{-9}$  сек. Время жизни метастабильных состояний может достигать десятых долей секунды.

Возможность спонтанных переходов указывает на то, что возбужденные состояния *нельзя* рассматривать как строго стационарные. В соответствии с этим значение энергии возбужденного состояния не является точно определенной величиной и возбужденный энергетический уровень имеет конечную ширину, поэтому кванты излучения

$$h\nu = E_2 - E_1$$

не строго монохроматичны, а соответствующая частота перехода с одного энергетического уровня на другой имеет разброс около некоторого значения. Величину этого разброса и характеризуют «ширина спектральной линии».



Из соотношений неопределённости для времени и энергии  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$  следует, что ширина уровня обратно

пропорциональна времени жизни  $\tau$  возбужденного состояния. *Естественную ширину* возбуждённого уровня энергии  $\Gamma$  определяют аналогично - как полную ширину разброса энергии на половине максимума интенсивности излучения,

соответствующую переходу с данного уровня энергии. В этом случае  $\Gamma = \hbar \cdot \delta\omega_0$ .

Принято считать, что среднее время жизни возбуждённого состояния  $\tau$  и естественная ширина уровня энергии  $\Gamma$  связаны соотношением  $\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$ . Тогда получаем выражение для связи естественной ширины спектральной линии и среднего времени жизни данного возбуждённого состояния  $\delta\omega_0 = \frac{1}{\tau}$ . Принимая, что  $\tau \sim 10^{-8}$  с, находим  $\delta\omega_0 = 10^8$  1/с.

Кроме естественной ширины спектральной линии немонохроматичность излучения может быть вызвана и другими причинами. Например, тепловым движением атомов. В этом случае наблюдается доплеровское уширение спектральных линий. Также в процессах испускания фотона атомы приобретает дополнительный импульс «отдачи», что тоже смещает спектральную линию.

## Гиромагнитное отношение.

Гиромагнитным отношением называется отношение магнитного момента  $\vec{p}_m$  к механическому моменту импульса  $\vec{L}$ . При классическом рассмотрении движения электрона по орбите это отношение равно  $\frac{\vec{p}_m}{\vec{L}} = -\frac{e}{2m_e}$  ( $e$  – элементарный заряд,  $m_e$  – масса электрона.) Знак минус показывает, что векторы  $\vec{p}_m$  и  $\vec{L}$  направлены противоположно. Из этого соотношения следует, что величина магнитного момента, связанного с орбитальным движением электрона равна



$p_m = \frac{e}{2m_e} \hbar \sqrt{l(l+1)}$ , а проекция магнитного момента электрона на какое-то направление опре-

деляется магнитным квантовым числом  $m$ :  $p_{m_z} = -\frac{e}{2m_e} \cdot L_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m$ .

Магнетоном Бора называется величина  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 0,927 \cdot 10^{-23}$  Дж/Тл.

С учётом этого определения получаем  $p_m = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$ ,  $p_{m_z} = -\mu_B m$ .

*Лекция 11. Механический и магнитный моменты атома.*

*Опыт Штерна и Герлаха. Орбитальный, спиновый и полный моменты импульса. Спин-орбитальное взаимодействие. Атом во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана.*

Атомы щелочных металлов следуют в таблице Менделеева сразу за благородными газами: литий за гелием, натрий за неоном, калий за аргоном и т.д. Т.е. они имеют на один электрон больше, чем эти газы. Но атомы благородных (инертных) газов обладают высокой устойчивостью, т.к. для их (первой) ионизации нужна сравнительно большая энергия – у гелия это 24,59 эВ, в то время как у лития – 5,39 эВ (первая ионизация – это удаление внешнего электрона). Зато энергия второй ионизации лития – 75,6 эВ значительно больше энергии первой ионизации. Это свидетельствует о том, что внешний электрон щелочных металлов сравнительно слабо связан с ядром, чем другие, внутренние, электроны. Поэтому для атомов щелочных металлов должно быть справедливо приближенное описание водородоподобного атома.

Но, как известно из теории водородоподобного атома, в уравнение Шрёдингера входит величина момента импульса электрона

$$\hbar^2 r^2 \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi \right) = \hat{L}^2 (\psi),$$

поэтому и решение уравнения и, вообще говоря, энергия водородоподобного атома должны зависеть от момента импульса электрона.

У щелочных металлов, в отличие от атома водорода, уровни энергии для одного и того же главного квантового числа зависят от значений азимутальных квантовых чисел. Т.е. энергия атомов щелочных металлов зависит от двух квантовых чисел – главного и орбитального.

При анализе спектров щелочных металлов с помощью спектроскопических приборов высокой разрешающей способности обнаруживается, что каждая из спектральных линий является дублетом, т.е. состоит из двух линий близких частот, или как говорят, расщепляется на две линии.

Таким образом, соответствующие энергетические уровни щелочных металлов тоже расщепляются. В итоге, энергия щелочного металла должна зависеть от дополнительного – третьего параметра. (Позднее расщепление было обнаружено и у атома водорода).

Попытки объяснить это явление привели к возникновению понятия спина. Первоначально, наличие спина пытались объяснить как механический (и магнитный) момент, возникающий из-за вращения электрона как волчка вокруг своей оси. Но это объяснение оказалось физически неприемлемым.

Спин является одновременно и квантовым и релятивистским свойством частиц. Существование спина вытекает из уравнения Дирака, которое справедливо для релятивистских частиц.

В 1925-26 годах Дж. Уленбек совместно с С. Гаудсмитом предложили рассматривать наличие у электрона собственного механического момента, не связанного с движением в пространстве.

*Спин* – собственный механический момент импульса частицы (угловой момент), не связанный с движением в пространстве. Величина собственного (спинового) механического момента задаётся выражением

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

где  $s$  – спиновое квантовое число, которое может принимать целые и полуцелые значения. Это число часто просто называют тоже спином. Для электрона  $s = \frac{1}{2}$ .

Проекция собственного механического момента на любое направление равна  $L_{sz} = m_s \hbar$ ,

где для электрона  $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$ .

Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что спиновое гиромагнитное отношение для электрона равно  $\frac{p_{ms}}{L_s} = -\frac{e}{m_e}$ , т.е. в два раза отличается от орбитального.

Собственный магнитный момент электрона тогда равен

$$p_{ms} = -\frac{e}{m_e} L_s = -\frac{e}{m_e} \hbar \sqrt{s(s+1)} = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = -\mu_B \sqrt{3} \approx 0,16 \cdot 10^{-22} \text{ А} \cdot \text{м}^2.$$

Проекция собственного магнитного момента электрона на произвольное направление, соответственно, определяется соотношением  $p_{ms_z} = -\frac{e}{m_e} L_{s_z} = \pm \frac{e}{m_e} s \cdot \hbar = \pm \mu_B$ .

Наличие собственного (спинового) магнитного момента у электрона приводит к тому, что между электроном и ядром появляется дополнительное взаимодействие (называемое *спин-орбитальным* взаимодействием). Если перейти в систему отсчёта, в которой электрон покоится, а ядро вращается вокруг него, то в области нахождения электрона появится магнитное поле, усреднённую индукцию которого можно обозначить как  $\vec{B}_z$ . Следовательно, собственный магнитный момент электрона будет взаимодействовать с этим магнитным полем, что приведёт к появлению энергии взаимодействия.

$$\Delta E_s = (\vec{p}_{ms}, \vec{B}_z) = p_{ms_z} B_z = \pm \mu_B \cdot B_z,$$

где  $p_{ms_z} = \pm \mu_B$  - проекция вектора  $\vec{p}_{ms}$  на направление вектора  $\vec{B}_z$ . Наличие этой добавки и приводит к расщеплению уровней энергии, т.к. эту энергию надо прибавлять к энергии электрона. Такое явление расщепления энергетических уровней принято называть *тонкой структурой уровней*.

Суммарный момент импульса электрона определяется равенством

$$L = \hbar \sqrt{j(j+1)},$$

где квантовое число  $j = |l - s|, l + s$ . Т.е. для  $l = 0$  получается одно значение  $j = \frac{1}{2}$ , а для  $l > 0$  - два значения  $j = l - \frac{1}{2}$  и  $j = l + \frac{1}{2}$ .

Дополнительный вклад в тонкую структуру даёт релятивистская поправка к кинетической энергии, возникающая благодаря высокой орбитальной скорости электрона. Этот эффект был впервые обнаружен Н.Бором и А.Зоммерфельдом, которые показали, что релятивистское изменение массы электрона должно вызывать прецессию его орбиты.

Учёт спин-орбитального взаимодействия и релятивистской поправки к массе электрона даёт следующее выражение для энергии тонкого расщепления уровней в водородоподобных атомах:

$$\Delta E = \Delta E_s + \Delta E_{rel} = \frac{\alpha^2 Z^4 R}{n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right)$$

где  $\alpha$  - константа, которая называется *постоянная тонкой структуры*.

*Замечание.* Постоянная тонкой структуры – одна из фундаментальных констант природы. Её смысл – это отношение энергии кулоновского взаимодействия двух электронов, находящихся друг от друга на расстоянии приведённой комптоновской длины волны (приведённая длина волны  $\lambda_c = \frac{\lambda_c}{2\pi}$ ), к энергии покоя электрона

$$\alpha = \frac{E_{кул}}{m_e c^2} = \frac{1}{m_e c^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\lambda_c} = 2\pi \frac{1}{m_e c^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{h} m_e c = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}.$$

Согласно спектроскопическим обозначениям состояние атома водорода с квантовыми числами  $n, l, s, j$  обозначается как  $n^{2s+1}l_j$ . Это значит, что  $2p$  состояние водорода с  $n = 2, l = 1$  и  $j = 3/2$  запишется в виде  $2^2 p_{3/2}$ . Величина  $2s + 1$  называется *мультиплетностью*; она показывает число состояний, связанных с данным значением спинового числа  $s$ . При этом энергия расщепления уровня при данном значении  $n$  зависит только от  $j$ , но не от  $l$  или  $s$  в отдельности. Таким образом, согласно вышеприведенной формуле  $2^2 s_{1/2}$  и  $2^2 p_{1/2}$  уровни тонкой структуры вырождены по энергии, т.к. значение энергии этих уровней одинаковое. Подобным образом вырождены и уровни  $3^2 p_{3/2}$  и  $3^2 d_{3/2}$ .

*Замечание.* В 1947 У. Э. Лэмб и Р. Ризерфорд посредством разработанного ими радиоспектроскопического метода показали, что уровень  $2^2 s_{1/2}$  смещён относительно уровня  $2^2 p_{1/2}$  на 1000 МГц. (Это явление получило название *Лэмбовский сдвиг уровней*.) За это открытие была присуждена Нобелевская премия в 1955 г. Объяснение этого явления было позднее дано в квантовой электродинамике (КЭД). Физической причиной Лэмбовского сдвига являются квантовые флуктуации вакуума электромагнитного и электронно-позитронного полей, которые меняют потенциальную энергию взаимодействия электрона с ядром.

Разрешенные переходы по квантовому числу  $j$  определяются *правилами отбора*:  $\Delta j = 0, \pm 1$  (исключая переходы  $j = 0 \rightarrow 0$ ).

#### Механический момент многоэлектронного атома.

Каждый электрон в атоме обладает орбитальным моментом импульса  $L_l$  и собственным (спиновым) моментом импульса  $L_s$ . Они образуют результирующие моменты атома. Так как каждый механический момент связан с соответствующим магнитным моментом, то моменты взаимодействуют между собой.

При этом возможны два случая

- 1) Орбитальный и спиновой моменты каждого электрона складываются в суммарный момент. Затем эти моменты объединяются в результирующий момент атома. Такой вид связи называется JJ – связью. Обычно такая связь наблюдается у тяжёлых атомов.
- 2) LS – связь (связь Рассел - Саундерса). Наиболее часто встречается у лёгких и средних атомов. В этом случае орбитальные моменты сильнее взаимодействуют друг с другом, чем со спиновыми, и, наоборот, спиновые сильнее взаимодействуют между собой сильнее, чем с орбитальными. Орбитальные моменты суммируются в суммарный орбитальный момент  $L_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}$ , а спиновые - в суммарный спиновой момент  $L_s = \hbar\sqrt{S(S+1)}$ . Здесь  $L$  – суммарное орбитальное число (с учётом возможных направлений),  $S$  – суммарное спиновое число.

Суммарный момент атома определяется как сумма суммарного спинового и суммарного орбитального моментов  $L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ , где квантовое число задаётся значением

$$J = |L - S|, \dots, L + S - 1, L + S.$$

Проекция результирующего механического момента на какое-то направление задаётся выражением  $L_{J_z} = m_J \hbar$ , где  $m_J = -J, -J + 1, \dots, +J$ .

Для обозначения квантовых чисел в многоэлектронном атоме используется условное обозначения (терм)  $^{2S+1}L_J$ .

Значение $L$	0	1	2	3	4
Обозначение	$S$	$P$	$D$	$F$	$G$

Число  $2S + 1$  называется мультиплетностью терма.

Магнитный момент атома определяется соотношением  $P_m = -g\mu_B\sqrt{J(J+1)}$ .

Здесь множитель  $g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$  называется *фактором Ланде*.

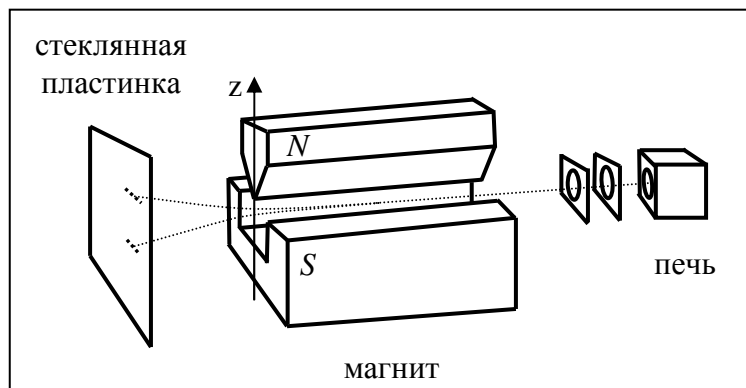
Проекция магнитного момента на какое-то направление даётся выражением  $P_{m_z} = -g\mu_B m_J$ .  
 $m_J = -J, -J+1, \dots, +J$ .

Правила отбора для квантовых чисел  $L, S, J$  имеют следующий вид: разрешёнными являются переходы, для которых числа  $L$  и  $J$  меняются не более, чем на единицу  $\Delta L = 0, \pm 1$ ,  $\Delta J = 0, \pm 1$ , а число  $S$  остаётся постоянным  $\Delta S = 0$ .

### Опыт Штерна - Герлаха

Опыт немецких физиков Отто Штерна и Вальтера Герлаха, осуществлённый в 1922 году, подтвердил наличие у атомов спина (изначально в эксперименте участвовали атомы серебра, а потом и других металлов) и факт пространственного квантования направления их магнитных моментов.

Опыт состоял в следующем: пучок атомов серебра пропускали через сильно неоднородное магнитное поле, создаваемое мощным постоянным магнитом специальной формы. При прохождении атомов через это поле, из-за наличия у них магнитных моментов, на них действовала зависящая от проекции спина на направление магнитного поля сила  $F_z = P_{m_z} \cdot \frac{\partial B}{\partial z}$ , отклонявшая летящие между магнитами атомы от их первоначального направления движения. Причём, если предположить, что магнитные моменты атомов ориентированы хаотично (непрерывно), то тогда на расположенной далее по направлению движения атомов стеклянной пластинке должна была проявиться сплошная размытая полоса. Однако вместо этого на пластинке образовались



две отдельные достаточно чёткие узкие полосы, что свидетельствовало в пользу того, что магнитные моменты атомов вдоль выделенного направления принимали лишь два определённых значения, и что подтверждало предположение квантово-механической теории о квантовании магнитного момента атомов.

Позднее с аналогичными результатами были проделаны опыты для пучков атомов других металлов, а также

пучков протонов и электронов. Эти опыты доказали существование магнитного момента у рассмотренных частиц и показали их квантовую природу, явив собой доказательство постулатов квантовой теории.

### Атом во внешнем магнитном поле

Если атом поместить во внешнее магнитное поле с индукцией  $\vec{B}_z$ , то из-за взаимодействия магнитного момента атома с полем у него появится дополнительная энергия

$$\Delta E = (\vec{P}_m \vec{B}_z) = P_{m_z} B_z, \text{ где } P_{m_z} - \text{проекция магнитного момента на направление } \vec{B}_z.$$

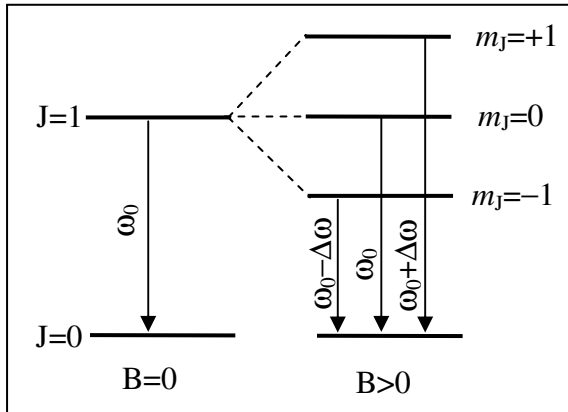
Т.к.  $P_{m_z} = -g\mu_B m_J$ , то величина дополнительной энергии определяется  $\Delta E = g\mu_B m_J B_z$ .

Поэтому у изолированного атома дополнительная энергия определяется одним из значений числа  $m_J = -J, -J+1, \dots, +J$ . В системе содержащей множество атомов будут присутствовать атомы со всевозможными значениями дополнительной энергии, что приведёт к расщеплению уровня энергии на количество, равное  $2J+1$ . Расщеплённые уровни энергии будут отдалены

друг от друга на одинаковое значение  $\Delta E = g\mu_B B_z = g\Delta E_0$ , где величину  $\Delta E_0 = \mu_B B_z$  принято называть *нормальным расщеплением* энергетического уровня.

До наложения магнитного поля энергетический уровень был вырожденным с кратностью вырождения  $2J + 1$ . После наложения внешнего магнитного поля произошло расщепление вырожденного уровня энергии на невырожденные уровни. Т.е. магнитное поле снимает вырождение уровня энергии.

Впервые в 1896 г. Питер Зееман наблюдал расщепление спектра линий поглощения атомов натрия в магнитном поле. Впоследствии этот экспериментальный факт получил название *эффект Зеемана*.



Для простого случая расщепления одиночной линии, когда  $S=0$ ,  $g=1$  ( $J=L$ ,  $m_J=m_L$ ), получаем, что  $\Delta E = \Delta E_0$  при расщеплении каждого уровня. при внесении таких атомов в магнитное поле каждая исходная спектральная линия с частотой  $\omega_0$  расщепляется на три линии с частотами  $\omega_1 = \omega_0 - \Delta\omega$ ,

$\omega_2 = \omega_0$ ,  $\omega_3 = \omega_0 + \Delta\omega$ . В этом случае смещение частоты  $\Delta\omega = \frac{\Delta E_0}{\hbar} = \frac{\mu_B B_z}{\hbar}$  называется *нормальным*

*смещением*. Данное расщепление уровней соответствует *простому или нормальному эффекту Зеемана*.

*Сложный или аномальный эффект Зеемана* состоит в расщеплении линий, причём величина расщепления определяется как рациональная дробь от нормального смещения

$$\Delta\omega = \frac{r}{q} \frac{\mu_B B_z}{\hbar}, \text{ где } r \text{ и } q - \text{целые числа.}$$

В слабом магнитном поле энергия взаимодействия между орбитальными и спиновыми магнитными моментами больше, чем энергия их взаимодействия с магнитным полем, поэтому спин-орбитальная связь не разрывается и атом взаимодействует с магнитным полем как единое целое.

В сильном магнитном поле связь между орбитальными и спиновыми магнитными моментами разрывается и в результате для любых переходов наблюдается нормальный зеемановский триплет. Это явление называется *эффектом Пашена-Бака*.

*Замечание.* Расщепление энергетических уровней происходит также при действии на атомы электрического поля. Это явление называется *эффект Штарка*.

## Лекция 12. Спонтанное и индуцированное излучение.

*Коэффициенты «А» и «В» Эйнштейна. Активные среды с инверсной заселенностью энергетических уровней. Оптические квантовые генераторы. Особенности лазерного излучения. Основные типы лазеров, их применение.*

*Вынужденное излучение. Коэффициенты «А» и «В» Эйнштейна.*

Атом может *самопроизвольно* перейти из одного состояния в другое, энергия которого меньше энергии предыдущего. Такой переход (и испускаемое при этом излучение) называется *спонтанным*.

Под действием *внешнего* излучения атом также может перейти из одного состояния в другое. Если энергия конечного состояния больше энергии начального, то атом поглощает энергию. Если энергия конечного состояния меньше энергии начального, то атом испускает энергию. Такой тип излучения называется *вынужденным* или *индуцированным излучением*. При этом внешнее излучение принято называть *вынуждающим излучением*.

*Направление распространения вынужденного излучения, его частота, фаза, поляризация полностью совпадают, соответственно, с направлением, частотой, фазой и поляризацией вынуждающего излучения. Следовательно, вынужденное и вынуждающее излучения являются строго когерентными.*

Рассмотрим у атома какие-то два уровня энергии  $E_n$  и  $E_m$ ,  $E_m > E_n$ . Для упрощения исследования предположим, что переход с уровня  $E_n$  на уровень  $E_m$  может быть *только* при поглощении кванта энергии, а обратный переход, с испусканием кванта энергии, может быть как спонтанным, так и вынужденным. Обозначим вероятность вынужденного перехода (в единицу времени) с уровня  $E_n$  на уровень  $E_m$  как  $P_{nm}$ , а вероятность вынужденного обратного перехода -  $P_{mn}$ . При высокой температуре  $T \rightarrow \infty$  доля спонтанных переходов будет незначительной, поэтому будут преобладать вынужденные переходы, следовательно, из условия термодинамического равновесия следует, что вероятности прямого и обратного переходов должны быть равными  $P_{nm} = P_{mn}$ .

Вероятность перехода с частотой  $\omega$  под действием вынуждающего излучения должна быть пропорциональна спектральной объёмной плотности энергии этого излучения  $P_{nm} = B_{nm} u_\omega$ ,  $P_{mn} = B_{mn} u_\omega$ . Коэффициенты пропорциональности  $B_{nm}$  и  $B_{mn}$  называются *коэффициентами* (коэффициенты «В») Эйнштейна. Из равенства  $P_{nm} = P_{mn}$  следует  $B_{nm} = B_{mn}$ .

В состоянии термодинамического равновесия количество атомов, перешедших в единицу времени с одного уровня энергии на другой, должно быть равным количеству атомов, перешедших в обратном направлении  $N_{nm} = N_{mn}$ . Но так как переход с меньшего уровня энергии  $E_n$  на больший  $E_m > E_n$  может быть только вынужденным, то  $N_{nm} = N_{nm}^{\text{ВЫНУЖД}}$ . Обратный переход (с большего уровня энергии на меньший) может быть как спонтанным, так и вынужденным

$$N_{mn} = N_{mn}^{\text{СПОНТ}} + N_{mn}^{\text{ВЫНУЖД}}.$$

Тогда в состоянии термодинамического равновесия выполняется равенство

$$N_{nm}^{\text{ВЫНУЖД}} = N_{mn}^{\text{СПОНТ}} + N_{mn}^{\text{ВЫНУЖД}}.$$

Вероятность спонтанного перехода (в единицу времени) с высокого уровня энергии на низкий обозначим как  $A_{mn}$  (это обозначение называется коэффициентом «А» Эйнштейна).

Количество атомов, находящихся в состоянии с энергией  $E_n$  обозначим через  $N_n$ , а в состоянии с энергией  $E_m$  -  $N_m$ .

Количество атомов, перешедших за единицу времени с одного уровня энергии на другой должно быть пропорциональным количеству атомов, находящихся на начальном уровне энергии  $N_{nm}^{\text{ВЫНУЖД}} = P_{nm} N_n = B_{nm} u_\omega N_n$ ,  $N_{mn}^{\text{ВЫНУЖД}} = P_{mn} N_m = B_{mn} u_\omega N_m$ ,  $N_{mn}^{\text{СПОНТ}} = A_{mn} N_m$ .

Подставляем эти выражения в условие термодинамического равновесия и получаем

$$B_{nm} u_{\omega} N_n = A_{mn} N_m + B_{mn} u_{\omega} N_m$$

откуда можно найти спектральную объёмную плотность равновесного излучения

$$u_{\omega} = \frac{A_{mn} N_m}{B_{nm} N_n - B_{mn} N_m} = \frac{A_{mn}}{B_{mn}} \frac{1}{N_n/N_m - 1}.$$

Для равновесной термодинамической системы можно применить классическое распределение Больцмана. Вероятность нахождения системы в одном из состояний со значением энергии  $E_n$  определяется выражением

$$p_n = \frac{\exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)}$$

здесь суммирование проводится по полному набору дискретных значений  $\{E_1, E_2, \dots, E_N\}$ .

Пусть общее число атомов системы равно  $N$ , тогда число атомов, находящихся в состоянии с энергией  $E_n$  равно  $N_n = p_n N$ , а в состоянии с энергией  $E_m$  - соответственно  $N_m = p_m N$ . Откуда

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{p_n N}{p_m N} = \frac{\exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)} \bigg/ \frac{\exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right)}{\sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)} = \exp\left(\frac{E_m - E_n}{kT}\right)$$

Но разность энергий равна энергии кванта излучения  $E_m - E_n = \hbar\omega$ . В итоге,  $\frac{N_n}{N_m} = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)$ .

Подставим это выражение в формулу для спектральной объёмной плотности энергии

$$u_{\omega} = \frac{A_{mn}}{B_{mn}} \frac{1}{N_n/N_m - 1} = \frac{A_{mn}}{B_{mn}} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$

Эта формула должна совпадать с формулой Планка для спектральной объёмной плотности энергии

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

Поэтому  $A_{mn} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{mn}$ . Откуда находим для вероятности спонтанного перехода

$$A_{mn} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{mn} \frac{u_{\omega,T}}{u_{\omega,T}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{P_{mn}}{\left[ \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \right]} = P_{mn} \left( \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1 \right).$$

Т.е., действительно, при больших значениях температуры  $T \rightarrow \infty$  вероятность спонтанного перехода в единицу времени значительно меньше вероятности вынужденного перехода.

*Замечание.* Вероятность спонтанного перехода с верхнего уровня энергии на нижний обратно пропорциональна среднему времени жизни возбуждённого состояния.

*Активные среды с инверсной заселенностью энергетических уровней.*

Вещество, находящееся в состоянии термодинамического равновесия поглощает проходящее через него излучение. Обычно в веществе количество атомов в основном состоянии гораздо больше, чем атомов возбужденных. Поэтому электромагнитная волна, проходя по веще-



ству, расходует свою энергию на возбуждение атомов. Интенсивность излучения  $I$  при этом падает, подчиняясь закону Бугера:

$$I = I_0 e^{-kl}$$

$l$  – геометрическая длина хода луча,  $I_0$  – начальная интенсивность при  $l = 0$ ,  $k$  – коэффициент поглощения.

В случае, когда количество атомов, находящихся в возбуждённом состоянии превышает количество атомов в основном состоянии, возможна ситуация, при которой интенсивность излучения будет возрастать по мере прохождения излучения сквозь вещество.

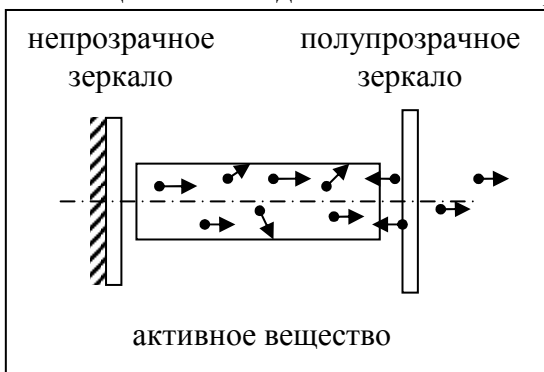
Вещество, в котором возбужденных атомов гораздо больше, чем атомов в основном состоянии, называется *активным*. Число атомов  $N_m$  на определенном уровне энергии  $E_m$  называется заселенностью этого уровня, а ситуация, когда  $N_m > N_n$  при  $E_m > E_n$  – *инверсной заселенностью* уровней.

Пусть по активному веществу проходит электромагнитная волна, частота которой соответствует переходу между уровнями энергии  $\omega_{nm} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$  с инверсной заселённостью. Тогда за счет индуцированного излучения при вынужденных переходах  $E_m \rightarrow E_n$  (которых будет значительно больше, чем актов поглощения  $E_n \rightarrow E_m$ ) будет происходить ее усиление. «Наглядно» это означает, что каждый пролетевший сквозь вещество фотон вызывает появление точно такого же фотона. Вместе они порождают еще два фотона, эти четыре – восемь и так далее – в активном веществе возникает фотонная лавина. Такое явление приводит к экспоненциальному закону нарастания интенсивности излучения, который записывается аналогично закону Бугера, но с коэффициентом (квантового) усиления  $\alpha$  вместо коэффициента поглощения  $k$ :  $I = I_0 e^{\alpha l}$ .

*Замечание.* Из отношения для населённости уровней  $\frac{N_m}{N_n} = \exp\left(\frac{E_m - E_n}{kT}\right)$  формально следует,

что инверсная населённость уровней  $N_m > N_n$  при  $E_m > E_n$  возможна при  $T < 0$ . Поэтому инверсную населённость уровней иногда называют состоянием с «отрицательной» температурой.

На практике, однако, столь стремительного роста числа фотонов не происходит. В реальных веществах всегда есть множество факторов, вызывающих потерю энергии электромагнитной волны (рассеяние на неоднородностях среды, поглощение примесями и пр.). В итоге, можно добиться усиления волны хотя бы в десятки раз, только увеличив длину ее пробега в активной среде до нескольких метров, что осуществить нелегко. Но есть и другой путь: поместить активное вещество между двумя параллельными зеркалами (в так называемый *оптический резонатор*). Волна, многократно отражаясь от них, пройдет достаточное для большого усиления расстояние, если, конечно, число возбужденных атомов будет оставаться большим, т.е. сохранится инверсная



заселенность.

Если одно из зеркал резонатора сделать полупрозрачным, то часть излучения выйдет наружу, а часть, после отражения будет возвращена в активную среду для генерации нового вынужденного излучения. (Так называемая *обратная связь*.)

В качестве «глухого» зеркала нередко используют призму полного внутреннего отражения, в качестве полупрозрачного – стопу стеклянных пластин.

После многократных отражений от зеркал останутся только те лучи, которые практически параллельны оси системы, остальные выйдут через боковые поверхности системы. (Как мы знаем, угол расхождения лучей в пучке  $\delta\varphi \approx \frac{\lambda}{b}$  обратно пропорционален ширине пучка  $b$ . По-

этому, даже при очень точном расположении параллельных плоских зеркал расхождение лучей является неустраняемым.)

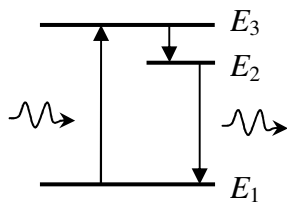
*Замечание.* Иногда применяют сферические зеркала большого радиуса.

После многократных отражений в системе появится большое количество волн, испущенных в разные моменты времени. Т.к. эти волны порождены вынужденным излучением, то они являются когерентными и между ними должна наблюдаться интерференция при отражении от зеркал. Если расстояние между зеркалами равно  $L$ , то условие усиления интенсивности для волн с длиной волны  $\lambda$  после  $N$  проходов (одной из них) между зеркалами имеет вид  $LN = m\lambda$  ( $m$  – целое число). Ввиду наличия естественной спектральной ширины излучения, в составе индуцированного излучения будут волны с длинами в некотором интервале  $(\lambda, \lambda + \delta\lambda)$ . Поэтому «выставляя» определенное расстояние между зеркалами можно добиться того, чтобы усиливалась та длина волны, на которую приходится максимум интенсивности излучения.

Инверсную заселенность можно осуществлять и поддерживать при помощи отдельного источника энергии, который как бы «накачивает» ею активное вещество. Таким источником может быть мощная лампа, электрический разряд, химическая реакция и т.п. Процесс создания инверсной заселённости уровней называют «накачкой».

Кроме того нужно, чтобы атомы на одном из верхних энергетических уровней оставались достаточно долго (относительно среднего времени жизни возбуждённого состояния) и чтобы там накопилось достаточное количество атомов вещества. А для этого необходимо иметь как минимум три уровня энергии рабочих частиц (атомов или ионов).

*Трехуровневая* схема генерации излучения работает следующим образом. Накачка переводит атомы с нижнего энергетического уровня  $E_1$  на самый верхний  $E_3$ . Оттуда они спускаются на метастабильный уровень  $E_2$ , где могут находиться достаточно долго без спонтанного испускания фотонов. И только под воздействием проходящей электромагнитной волны атом возвращается на основной уровень  $E_1$ , испуская вынужденное излучение частотой



$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}, \text{ когерентное исходной волне.}$$

Устройства, в которых реализуется указанный принцип генерации вынужденного излучения получили общее название – *квантовые генераторы*.

Излучение, получаемое с помощью квантовых генераторов, обладает большой пространственной и временной когерентностью, высокой степенью монохроматичности, является поляризованным и узконаправленным потоком излучения (имеет малый угол расхождения пучка).

### *Оптические квантовые генераторы.*

*Особенности лазерного излучения. Основные типы лазеров, их применение.*

Мазер (от английской аббревиатуры MASER - *microwave amplification by stimulated emission of radiation* - усиление микроволн с помощью вынужденного излучения) - квантовый генератор, излучающий в диапазоне радиоволн.

Лазер (от английской аббревиатуры LASER - *light amplification by stimulated emission of radiation* - усиление света посредством вынужденного излучения) - оптический квантовый генератор, излучающий в диапазоне видимого света.

Явление индуцированного излучения было предсказано Эйнштейном в 1916 году. Условия создания инверсной населенности и экспериментального обнаружения вынужденного излучения сформулировал немецкий физик Р. Ланденбург в 1928 г. и независимо от него советский физик В.А.Фабрикант в 1939 г. Вынужденное излучение в виде коротких радиоимпульсов впервые наблюдали американские физики Е.Парселл и Р.Паунд в 1950 г. Принципиальную возможность построения квантовых генераторов начали обсуждать уже в начале 1950-х независимо друг от друга в СССР Н.Г.Басов с А.М.Прохоровым, и в США Ч.Таунс с Дж.Вебером. А в 1954–1956 был разработан и сконструирован первый квантовый генератор радиодиапазона - ма-

зер ( $\lambda = 1,25 \text{ см}$ ), в 1960 – лазер на рубине и газовый лазер, и спустя два года – полупроводниковый лазер.

В 1964 г Прохорову, Басову и Таунсу была присуждена Нобелевская премия по физике «за фундаментальные работы в области квантовой электроники, которые привели к созданию осцилляторов и усилителей, основанных на принципе лазера - мазера». Изначально, после изобретения, считалось, что мазер - чисто человеческое творение, однако позже астрономы обнаружили, что некоторые из далёких галактик работают как исполинские мазеры. В огромных газовых облаках, размером в миллиарды километров, возникают условия для генерации, а источником накачки служит космическое излучение. Мазеры используются в технике (в частности, в космической связи), в физических исследованиях, а также как квантовые генераторы стандартной частоты

Несмотря на большое разнообразие типов активных сред и методов получения инверсной заселенности все лазеры имеют три основные части: активную среду, систему накачки и резонатор.

Активная среда – вещество, в котором создается инверсная заселенность, – может быть твердой (кристаллы рубина или алюмо-иттриевого граната, стекло с примесью неодима в виде стержней различного размера и формы), жидкой (растворы анилиновых красителей или растворы солей неодима в кюветах) и газообразной (смесь гелия с неоном, аргон, углекислый газ, водяной пар низкого давления в стеклянных трубках). Полупроводниковые материалы и холодная плазма, продукты химической реакции тоже дают лазерное излучение. В зависимости от типа активной среды лазеры называются рубиновыми, гелий-неоновыми, на красителях и т.п.

*Накачка* создает инверсную заселенность в активных средах, причем для каждой среды выбирается наиболее удобный и эффективный способ накачки. В твердотельных и жидкостных лазерах используют импульсные лампы или лазеры, газовые среды возбуждают электрическим разрядом, полупроводники – электрическим током.

Как уже отмечалось, излучение, получаемое с помощью лазеров, обладает большой пространственной и временной когерентностью, высокой степенью монохроматичности, является поляризованным и узконаправленным потоком излучения (имеет малый угол расхождения пучка). Как правило, расхождение пучка лучей достигает  $10^{-5}$  рад. Это значит, что на Луне такой пучок, посланный с Земли, даст пятно диаметром около 3 км.

Лазеры являются самыми мощными источниками светового излучения. В узком интервале спектра (в течение промежутка времени, продолжительностью порядка  $10^{-13}$  с) у некоторых типов лазеров достигается мощность излучения порядка  $10^{17}$  Вт/см<sup>2</sup>, в то время как мощность излучения Солнца равна только  $7 \cdot 10^3$  Вт/см<sup>2</sup>, причём суммарно по всему спектру. На узкий же интервал  $\lambda \sim 10^{-6}$  см (это ширина спектральной линии лазера) приходится у Солнца всего лишь 0,2 Вт/см<sup>2</sup>. Если задача заключается в преодолении порога в  $10^{17}$  Вт/см<sup>2</sup>, то прибегают к различным методам повышения мощности.

#### *Рубиновый лазер.*

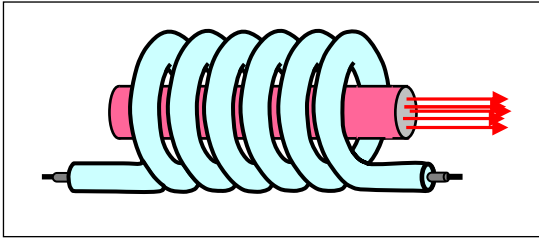
В декабре 1960 г. Т. Мейман (США) построил первый успешно работавший оптический квантовый генератор, в котором в качестве активного вещества был использован синтетический рубин.

Рубин является одним из широко используемых материалов для твердотельных лазеров, применяемых в голографии, главным образом из-за большой энергии выходного излучения и его длины волны.

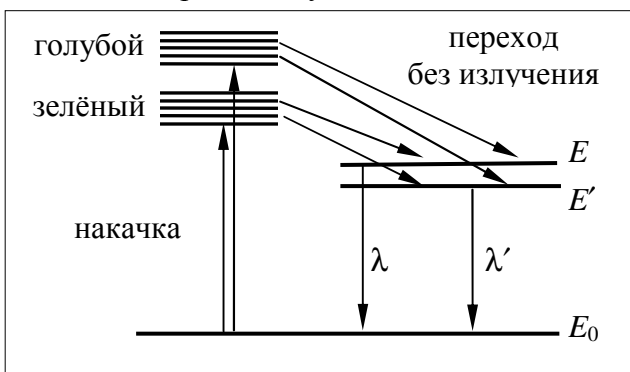
Рубин представляет собой окись алюминия, в которой часть атомов алюминия замещена атомами хрома ( $Al_2O_3 \cdot Cr_2O_3$ ). Активным веществом служат ионы хрома  $Cr^{3+}$ . От содержания хрома в кристалле зависит его окраска. Обычно используется бледно-розовый рубин, содержащий около 0,05% хрома (от веса рубина). Рубиновый кристалл выращивают в специальных печах, затем полученную заготовку отжигают и обрабатывают, придавая ей форму стержня. Длина стержня колеблется от 2 до 30 см, диаметр от 0,5 до 2 см. Плоские торцовые концы делают строго параллельными, шлифуют и полируют с высокой точностью. Иногда отражающие поверхности наносят не на отдельные отражающие пластины, а непосредственно на торцы руби-

нового стержня. Поверхности торцов серебруют, причем поверхность одного торца делают полностью отражающей, другого - отражающей частично. Обычно коэффициент пропускания света второго торца составляет около 10—25%, но может быть и другим.

Кристалл рубина имеет две полосы поглощения: в зеленой и в голубой части спектра. Помимо этих полос имеются два узких энергетических уровня  $E$  и  $E'$ , при переходе с которых на основной уровень  $E_0$  атом излучает свет с длинами волн  $\lambda=694,4$  нм и  $\lambda'=692,8$  нм. Ширина этих линий  $\sim 0,4$  нм, вероятность вынужденных переходов для линии 694,4 нм больше, чем для  $\lambda'=692,8$  нм.

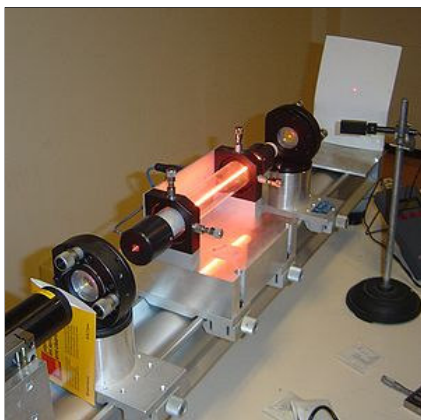


В рубиновом лазере используется оптическая накачка ксеноновой лампой, которая дает вспышки белого света большой интенсивности при прохождении через нее импульса тока. Для этого рубиновый стержень помещают в спиральную импульсную ксеноновую лампу, витки которой охватывают его со всех сторон. Вспышка лампы длится миллисекунды. За это время лампа потребляет энергию в несколько тысяч джоулей, большая часть которой уходит на нагревание прибора. Газ ксенон при этом разогревается до нескольких тысяч градусов. Непрерывная накачка невозможна, т.к. лампа не выдерживает длительного нагрева. Излучение лампы накачки поглощается ионами  $Cr^{3+}$  в области полос поглощения.



Затем с этих уровней ионы  $Cr^{3+}$  очень быстро в результате безизлучательного перехода переходят на энергетические уровни  $E$  и  $E'$ . Излишек энергии передается кристаллической решетке в энергию ее колебаний (энергию фононов). Уровни  $E$  и  $E'$  - метастабильны (время жизни атома на уровне  $E'$  равно 4,3 мс). Таким образом, создается значительная инверсная населенность активной среды относительно уровня  $E_0$ .

### Гелий-неоновый лазер



Гелий-неоновый лазер. Светящийся луч в центре - электрический разряд.

В гелий-неоновом  $He-Ne$  лазере активной средой является газообразная смесь гелия и неона. Генерация осуществляется при переходах между энергетическими уровнями  $Ne$ , а  $He$  играет роль посредника, через который энергия накачки передается атомам  $Ne$ .

Атом  $Ne$  может генерировать в результате более 130 различных энергетических переходов. Однако наиболее интенсивными являются линии излучения 632,8 нм, 1,15 мкм, и 3,39 мкм. При пропускании тока через смесь  $He-Ne$  атомы гелия в результате электронных ударов возбуждаются до состояний  $2^3S$  и  $2^1S$ , которые являются метастабильными, т.к. переход с них в основное состояние запрещен квантово-механическими правилами отбора. Когда возбужденный атом гелия сталкивается с возбужденным атомом неона, то энергия переходит от  $He$  к  $Ne$ . Этот переход происходит весьма эффективно, т.к. уровни  $2S$  и  $2S$  атома  $Ne$  совпадают с соответствующими энергетическими

уровнями атома  $He$ . В следствие этого на уровнях  $3S$  и  $2S$  неона образуется инверсная населенность относительно уровней  $3P$  и  $2P$ .

$He-Ne$  лазер работает в непрерывном режиме. На торцы лазерной трубки наклеены многослойные зеркала под углами Брюстера к оси. Это обеспечивает линейную поляризацию излучения. Давление  $He-332$  Па,  $Ne-66$  Па в трубке, постоянное напряжение на электродах в трубке 4 кВ, коэффициенты отражения зеркал 0,999 и 0,990. Гелий-неоновые лазеры компактны, ти-

пичный размер резонатора - от 15 см до 0,5 м, их выходная мощность варьируется от 1 до 100 мВт.

Полоса пропускания, в которой сохраняется эффект усиления излучения рабочим телом лазера, довольно узка, и составляет около 1,5 ГГц, что объясняется наличием доплеровского смещения. Это свойство делает гелий-неоновые лазеры хорошими источниками излучения для использования в голографии, спектроскопии, а также в устройствах считывания штрих-кодов.

#### *Виды лазеров.*

*Рабочее тело* является основным определяющим фактором рабочей длины волны, а также остальных свойств лазера. Существует большое количество различных рабочих тел, на основе которых можно построить лазер.

В лазерах, в основном, используются следующие рабочие тела. *Твёрдые тела*, такие как кристаллы и стекло. *Газы*, например, углекислый газ, аргон, криптон или смеси, такие как в гелий-неоновых лазерах. *Полупроводники* - материалы, в которых переход электронов между энергетическими уровнями может сопровождаться излучением. *Жидкости*, как, например, в лазерах на красителях.

*Источник накачки* подаёт энергию в систему. В его качестве могут выступать: электрический разрядник, импульсная лампа, дуговая лампа, другой лазер, химическая реакция, взрывчатое вещество.

По виду рабочего тела лазеры делятся на типы.

*Твердотельные лазеры* на люминесцирующих твёрдых средах (диэлектрические кристаллы и стёкла). В качестве активаторов обычно используются ионы редкоземельных элементов или ионы группы железа Fe. Сплошной материал обычно легируется (*активируется*) добавкой небольшого количества ионов хрома, неодима, эрбия или титана. Типичные используемые кристаллы: алюмо-иттриевый гранат (YAG), литиево-иттриевый фторид (YLF), сапфир (оксид алюминия) и силикатное стекло. Самые распространённые варианты: Nd:YAG, титан-сапфир, хром-сапфир (известный также как рубин), легированный хромом стронций-литий-алюминиевый фторид (Cr:LiSAF), Er:YLF и Nd:glass (неодимовое стекло). Накачка - оптическая и от полупроводниковых лазеров, осуществляется по трёх- или четырёхуровневой схеме. Твердотельные лазеры обычно накачиваются импульсной лампой или другим лазером. Современные твердотельные лазеры способны работать в импульсном, непрерывном и квазинепрерывном режимах.

*Полупроводниковые лазеры.* Формально также являются твердотельными, но традиционно выделяются в отдельную группу, поскольку имеют иной механизм накачки - инжекция избыточных носителей заряда через *p-n* переход или гетеропереход, электрический пробой в сильном поле, бомбардировка быстрыми электронами, а квантовые переходы происходят между разрешёнными энергетическими зонами, а не между дискретными уровнями энергии. Полупроводниковые лазеры - наиболее употребительный в быту вид лазеров. Полупроводниковые лазеры очень компактны, накачиваются электрическим током, что позволяет использовать их в бытовых устройствах, таких как проигрыватели компакт-дисков. Кроме этого применяются в спектроскопии, в системах накачки других лазеров, а также в медицине.

*Лазеры на красителях.* Тип лазеров, использующий в качестве активной среды раствор флюоресцирующих с образованием широких спектров органических красителей. Состоят из органического растворителя, например метанола, этанола или этиленгликоля, в которых растворены химические красители, например кумарин или родамин. Конфигурация молекул красителя определяет рабочую длину волны. Лазерные переходы осуществляются между различными колебательными подуровнями первого возбуждённого и основного синглетных электронных состояний. Накачка оптическая, могут работать в непрерывном и импульсном режимах. Основной особенностью является возможность перестройки длины волны излучения в широком диапазоне. Применяются в спектроскопических исследованиях.

*Газовые лазеры* - лазеры, активной средой которых является смесь газов и паров. Отличаются высокой мощностью, монохроматичностью, а также узкой направленностью излучения. Работают в непрерывном и импульсном режимах. В зависимости от системы накачки газовые

лазеры разделяют на газоразрядные лазеры, газовые лазеры с оптическим возбуждением и возбуждением заряженными частицами (например, лазеры с ядерной накачкой), газодинамические и химические лазеры. По типу лазерных переходов различают газовые лазеры на атомных переходах, ионные лазеры, молекулярные лазеры на электронных, колебательных и вращательных переходах молекул и эксимерные лазеры.

*Газодинамические лазеры* - газовые лазеры с тепловой накачкой, инверсия населённостей в которых создаётся между возбуждёнными колебательно-вращательными уровнями гетероядерных молекул путём адиабатического расширения движущейся с высокой скоростью газовой смеси (чаще  $N_2+CO_2+He$  или  $N_2+CO_2+H_2O$ , рабочее вещество -  $CO_2$ ).

Эксимерные лазеры - разновидность газовых лазеров, работающих на энергетических переходах эксимерных молекул (димерах благородных газов, а также их моногалогенидов), способных существовать лишь некоторое время в возбуждённом состоянии. Накачка осуществляется пропусканием через газовую смесь пучка электронов, под действием которых атомы переходят в возбуждённое состояние с образованием эксимеров, фактически представляющих собой среду с инверсией населённостей. Эксимерные лазеры отличаются высокими энергетическими характеристиками, малым разбросом длины волны генерации и возможности её плавной перестройки в широком диапазоне.

*Химические лазеры* - разновидность лазеров, источником энергии для которых служат химические реакции между компонентами рабочей среды (смеси газов). Лазерные переходы происходят между возбуждёнными колебательно-вращательными и основными уровнями составных молекул продуктов реакции. Для осуществления химических реакций в среде необходимо постоянное присутствие свободных радикалов, для чего используются различные способы воздействия на молекулы для их диссоциации. Отличаются широким спектром генерации в ближней ИК-области, большой мощностью непрерывного и импульсного излучения.

*Лазеры на свободных электронах* - лазеры, активной средой которых является поток свободных электронов, колеблющихся во внешнем электромагнитном поле (за счёт чего осуществляется излучение) и распространяющихся с релятивистской скоростью в направлении излучения. Основной особенностью является возможность плавной широкодиапазонной перестройки частоты генерации. Различают *убитроны* и *скаттроны*, накачка первых осуществляется в пространственно-периодическом статическом поле ондулятора, вторых - мощным полем электромагнитной волны. Существуют также мазеры на циклотронном резонансе и *строфотроны*, основанные на тормозном излучении электронов, а также *флимагроны*, использующие эффект черенковского и переходного излучений.

*Квантовые каскадные лазеры* - полупроводниковые лазеры, которые излучают в среднем и дальнем инфракрасном диапазоне. В отличие от обычных полупроводниковых лазеров, которые излучают посредством вынужденных переходов между разрешенными электронными и дырочными уровнями, разделенными запрещённой зоной полупроводника, излучение квантовых каскадных лазеров возникает при переходе электронов между слоями гетероструктуры полупроводника и состоит из двух типов лучей, причем вторичный луч обладает весьма необычными свойствами и не требует больших затрат энергии.

*Волоконный лазер* - лазер, резонатор которого построен на базе оптического волокна, внутри которого полностью или частично генерируется излучение. При полностью волоконной реализации такой лазер называется *цельноволокнным*, при комбинированном использовании волоконных и других элементов в конструкции лазера он называется *волоконно-дискретным* или *гибридным*.

Возможны и другие виды лазеров, разработка которых находится на этапе исследований – *рентгеновские лазеры, гамма-лазеры* и др.

*Лекция 13. Квантовые системы из одинаковых частиц.*

*Принцип тождественности одинаковых микрочастиц. Симметричные и антисимметричные состояния (волновые функции) тождественных микрочастиц. Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Периодическая система элементов.*

По представлениям классической физики частицы можно различить либо сравнивая их свойства (масса, электрический заряд, спин) либо отслеживая траекторию каждой частицы. Это основано на том, что в классической механике в процессах взаимодействия частиц можно измерить положение каждой частицы с бесконечной точностью. Но этот подход противоречит принципам квантовой механики. Состояние частицы в квантовой механике описывается с помощью волновой функции, которая позволяет определить лишь вероятность нахождения частицы в данной точке пространства. В случае перекрытия в пространстве волновых функций двух (или более) частиц с одинаковыми свойствами происходит «перекрытие» областей обнаружения этих частиц. Тогда поведение системы в целом описывается одной волновой функцией, следовательно, в этом случае, нет смысла говорить о том, какая из частиц находится в данной точке области; имеет смысл говорить лишь о вероятности нахождения в окрестности этой точки одной из частиц. В квантовой механике одинаковые частицы, как говорят, являются «неразличимыми».

*Тожественные (иначе неразличимые) частицы* - это частицы, которые *принципиально* не могут быть распознаны и отличены одна от другой. К таким частицам относятся: элементарные частицы (электроны, нейтроны и т.д.), а также составные микрочастицы, такие как атомы и молекулы. Существует два больших класса тождественных частиц: *бозоны* и *фермионы*.

Частицы с целым спином относят к классу *бозонов*. Частицы с нецелым спином относят к классу *фермионов*.

*Принцип тождественности одинаковых частиц* гласит, что в замкнутой системе для одинаковых (то есть обладающих одинаковыми свойствами: массой, зарядом, спином и т.п.) частиц реализуются только такие квантовые состояния, которые не меняются при перестановке местами двух любых одинаковых частиц.

Принцип тождественности является одним из основных различий между классической и квантовой механикой. В классической механике можно проследить за движением отдельных частиц по траекториям и таким образом отличить их друг от друга. В квантовой механике тождественные частицы *полностью* лишены индивидуальности.

*Замечание.* Принцип тождественности в квантовой механике является существенно новым, то есть он логически не вытекает из остальных основных её положений, но он им не противоречит. Он подтверждается всей совокупностью опытных фактов.

Рассмотрим волновую функцию, описывающую систему тождественных частиц. Согласно принципу тождественности состояние системы не изменится, если переставить любые две частицы. Зависимость пси-функции от параметров переставляемых частиц условно обозначим цифрами 1 и 2. Тогда волновая функция до перестановки имеет вид  $\Psi(1,2)$ , а после перестановки  $\Psi(2,1)$ . Так состояние системы не меняется при перестановке, то функция плотности вероятности не должна измениться и в каждой точке области выполняется равенство

$$|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2.$$

Это выполняется в частности, если при перестановке пси-функция либо меняет знак  $\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$ , либо не меняет знак  $\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$ .

Говорят, что если при перестановке любых двух аргументов функция меняет знак, то она является *антисимметричной* (по аргументам), если нет – то *симметричной*.

*Системы фермионов описываются антисимметричными функциями, а системы бозонов – симметричными.*

### Принцип Паули.

Прямым следствием принципа тождественности одинаковых частиц является принцип Паули.

*Принцип Паули* (принцип запрета) - один из фундаментальных принципов квантовой механики, согласно которому *два и более тождественных фермиона не могут одновременно находиться в одном квантовом состоянии*.

Принцип Паули можно сформулировать следующим образом: в пределах одной квантовой системы в данном квантовом состоянии может находиться только один фермион, состояние другого должно отличаться хотя бы одним квантовым числом.

Действительно, т.к. системы фермионов описываются антисимметричными функциями, то при перестановке двух тождественных фермионов выполняется равенство  $\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$ . Но т.к. частицы являются *тождественными*, то их нельзя различить, следовательно, нельзя пронумеровать. В этом случае пси-функция не должна зависеть от номеров тождественных частиц, т.е.  $\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$ . Получаем равенство  $\Psi(1,2) = -\Psi(1,2)$ , откуда следует  $\Psi(1,2) = 0$ , т.е. такое состояние является *нереализуемым*.

В системе, состоящей из тождественных бозонов нет ограничений на количество частиц, которые могут находиться в одном состоянии.

Отсюда следует, что статистические функции распределения частиц в системах, состоящих из тождественных бозонов и системах состоящих из тождественных фермионов должны быть различными. Поведение систем тождественных фермионов описывается статистикой Ферми – Дирака, а бозонов – Бозе-Эйнштейна.

### Квантово-механическая модель атома

Современная модель атома является развитием планетарной модели. Согласно этой модели, ядро атома состоит из положительно заряженных протонов и не имеющих заряда нейтронов и окружено отрицательно заряженными электронами. Однако представления квантовой механики не позволяют считать, что электроны движутся вокруг ядра по сколько-нибудь определённым траекториям (неопределённость координаты электрона в атоме может быть сравнима с размерами самого атома). Говорят, что электроны образуют «электронное облако» вокруг ядра.

Электронное облако изолированного атома не изменяет своей формы с течением времени относительно ядра. Говорят, что электрон «движется» по *орбитали*. Существует дискретный набор таких *орбиталей*, и электроны могут находиться длительное время только в этих состояниях.

*Замечание.* Название «орбиталь» (а не орбита) отражает отличие от классического движения по траектории.

*Орбиталь* - одноэлектронная волновая функция в сферически симметричном электрическом поле атомного ядра, задающаяся главным  $n$ , орбитальным  $l$  и магнитным  $m$  квантовыми числами.

### Метод самосогласованного поля

Атом, как составную систему, можно полностью описать только полной волновой функцией. Однако такое описание практически невозможно для атомов сложнее атома водорода - самого простого из всех атомов химических элементов. Удобно применять приближённое описание - *метод самосогласованного поля* (метод Хартри-Фока). В этом методе вводится понятие о волновой функции *каждого* электрона. Волновая функция всей системы (атома) записывается как надлежащим образом симметризованное произведение *одноэлектронных* волновых функций. При вычислении волновой функции каждого электрона поле всех остальных электронов учитывается как внешний потенциал, зависящий в свою очередь от волновых функций этих остальных электронов.

В результате применения метода самосогласованного поля получается сложная система нелинейных интегро-дифференциальных уравнений. Нахождение явного решения такой системы является весьма трудоёмкой задачей.



Однако уравнения самосогласованного поля имеют вращательную симметрию (то есть они сферически симметричны). Это позволяет полностью классифицировать одноэлектронные волновые функции, из которых составляется полная волновая функция атома. Волновую функцию электрона в самосогласованном поле можно охарактеризовать квантовыми числами.

#### Квантовые числа.

Главное квантовое число  $n$  может принимать любые целые положительные значения, начиная с единицы ( $n = 1, 2, 3, \dots \infty$ ) и определяет общую энергию электрона на данной орбитали (энергетический уровень). Энергия для  $n = \infty$  соответствует энергии одноэлектронной ионизации для данного энергетического уровня.

Орбитальное квантовое число  $l$  (называемое также азимутальным квантовым числом) определяет момент импульса электрона и может принимать целые значения от 0 до  $n - 1$ .

Орбитали принято называть по буквенному обозначению их орбитального числа:

Значение орбитального квантового числа $l$	0	1	2	3	4
Буквенное обозначение	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>

*Замечание.* Буквенные обозначения атомных орбиталей произошли от описания спектральных линий в атомных спектрах: *s (sharp)* - резкая серия в атомных спектрах, *p (principal)* - главная, *d (diffuse)* - диффузная, *f (fundamental)* - фундаментальная.

Магнитное квантовое число  $m$  определяет проекцию орбитального момента импульса на направление магнитного поля и может принимать целые значения в диапазоне от  $-l$  до  $l$ , включая 0 ( $m = -l \dots 0 \dots l$ ).

Общее количество возможных состояний с одинаковым главным квантовым числом  $n$  с учётом двух возможных проекций спина на некоторое направление  $\uparrow\downarrow$  равно  $2n^2$ .

#### Геометрическое представление орбитали.

Для геометрического представления атомной орбитали указывают область пространства, в которой вероятность нахождения электрона не меньше определённого значения (обычно в диапазоне значений 0,9-0,99).

Поскольку энергия электрона определяется кулоновским взаимодействием и, следовательно, расстоянием от ядра, то главное квантовое число  $n$  задаёт размер орбитали.

Форма и симметрия орбитали задаются орбитальными квантовыми числами  $l$  и  $m$ :

*s*-орбитали являются сферически симметричными,

*p*, *d* и *f*-орбитали имеют более сложную форму, определяемую угловыми частями волновой функции - угловыми функциями. Угловые функции  $Y_{lm}(\varphi, \theta)$  - собственные функции оператора квадрата углового момента  $\hat{L}^2$ , зависящие от квантовых чисел  $l$  и  $m$ , являются комплексными и описывают в угловых координатах ( $\varphi, \theta$ ) зависимость вероятности нахождения электрона в центральном поле атома. Линейная комбинация этих функций определяет положение орбиталей относительно декартовых осей координат.

#### Электронная оболочка

Совокупность орбиталей с одинаковым значением главного квантового числа  $n$  составляют один *электронный слой*.

*Электронная оболочка* атома (электронный подслой) - область пространства вероятного местонахождения электронов, характеризующихся одинаковыми значениями главного квантового числа  $n$  и азимутального  $l$ . В одной электронной оболочке может находиться  $2(2l+1)$  электронов. (Коэффициент 2 соответствует двум вариантам проекции спина). Поэтому электронный слой может иметь максимальное число электронов  $2 \cdot \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$ .

Электронные слои обозначаются буквами *K, L, M, N, O, P, Q* или цифрами от 1 до 7.

Каждый слой состоит из одной или нескольких оболочек (подслоёв), каждая из которых состоит из атомных орбиталей. Оболочек обозначаются буквами *s, p, d, f, g, h, i* или цифрами от 0 до 6. К примеру, первая оболочка K состоит из одного подуровня *1s*. Вторая оболочка L состоит из двух подуровней, *2s* и *2p*. Третья оболочка - из *3s, 3p* и *3d*. И т.д.

Распределение электронов по оболочкам

Значение $n$	Обозначение	Оболочки					Максимальное число электронов
		$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	
1	K	2	-	-	-	-	2
2	L	2	6	-	-	-	8
3	M	2	6	10	-	-	18
4	N	2	6	10	14	-	32
5	O	2	6	10	14	18	50
...							

Так как электроны являются фермионами, принцип Паули запрещает им принимать одинаковые квантовые состояния. В итоге, все электроны не могут быть в одном квантовом состоянии с наименьшей энергией (для невозбуждённого атома), а заполняют *последовательно* квантовые состояния с наименьшей суммарной энергией. Примером может служить невозбуждённый атом лития ( $Li$ ), у которого два электрона находятся на  $1s$  орбитали (самой низкой по энергии), при этом у них отличаются собственные моменты импульса и третий электрон не может занимать  $1s$  орбиталь, так как будет нарушен запрет Паули. Поэтому, третий электрон занимает  $2s$  орбиталь, т.к. это орбиталь соответствует следующему по возрастанию значению энергии.

По мере увеличения суммарного числа электронов в атомах (при возрастании зарядов их ядер, или порядковых номеров химических элементов) атомные орбитали заселяются таким образом, что появление электронов на орбитали с более высокой энергией зависит не только от главного квантового числа  $n$ , но и от  $l$ . Взаимодействие между электронами приводит к резко усложнённой энергетической последовательности заселяющихся электронами атомных орбиталей. Поэтому в реальных многоэлектронных атомах картина энергетического распределения орбиталей оказывается очень сложной.

Порядок заполнения электронных слоёв (орбиталей с одинаковым значением главного квантового числа  $n$ ) определяется *правилом Клечковского*, порядок заполнения электронами орбиталей в пределах одной электронной оболочки (орбиталей с одинаковыми значениями главного квантового числа  $n$  и орбитального квантового числа  $l$ ) определяется *правилом Хунда*. При этом на каждой орбитали может быть не более двух электронов, отличающихся значением спинового квантового числа  $s$  (спина).

*Правило Клечковского* (или, как иногда говорят, правило  $n+l$ ) - эмпирическое правило, описывающее энергетическое распределение орбиталей в многоэлектронных атомах. *Заполнение электронами орбиталей в атоме происходит в порядке возрастания суммы главного и орбитального квантовых чисел  $n+l$ . При одинаковой сумме раньше заполняется орбиталь с меньшим значением  $n$ .* (Это правило предложено в 1936 г. немецким физиком Э. Маделунгом, а в 1951 г. было вновь сформулировано советским физиком В. М. Клечковским.)

*Замечание.* Эмпирическое правило Клечковского и вытекающее из него схема очерёдности нарушаются у некоторых атомов (Cr, Cu, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Pt, Au), когда имеет место «провал» электрона с  $s$ -подуровня внешнего слоя на  $d$ -подуровень предыдущего слоя, что приводит к энергетически более устойчивому состоянию атома, а именно: после заполнения двумя электронами орбитали  $6s$  следующий электрон появляется на орбитали  $5d$ , а не  $4f$ , и только затем происходит заселение четырнадцатью электронами  $4f$  орбиталей, затем продолжается и завершается заселение десятиэлектронного состояния  $5d$ . Аналогичная ситуация характерна и для орбиталей  $7s$ ,  $6d$  и  $5f$ .

*Правило Хунда* (Фридрих Хунд (*Friedrich Hund*) - немецкий физик) определяет порядок заполнения орбиталей определённой оболочки и формулируется следующим образом: *суммарное значение спинового квантового числа электронов данного подслоя должно быть максимальным.* Это означает, что в каждой из орбиталей оболочки заполняется сначала один электрон, а только после исчерпания незаполненных орбиталей на эту орбиталь добавляется второй электрон. При этом на одной орбитали находятся два электрона с полужелыми спинами противополо-

ложного знака, которые спариваются (образуют двухэлектронное облако) и, в результате, суммарный спин орбитали становится равным нулю.

*Замечание. Другая формулировка правила Хунда* ниже по энергии лежит тот атомный терм, для которого выполняются два условия.

1. Мультиплетность  $2S+1$  максимальна
2. При совпадении мультиплетностей суммарный орбитальный момент  $L$  максимален.

Краткую запись распределения электронов в атоме по различным электронным оболочкам атома с учётом их главного и орбитального квантовых чисел  $n$  и  $l$  называют электронной конфигурацией атома.

*Электронная конфигурация* - формула расположения электронов по различным электронным оболочкам атома химического элемента или молекулы.

С точки зрения квантовой механики электронная конфигурация - это полный перечень одноэлектронных волновых функций, из которых с достаточной степенью точности можно составить полную волновую функцию атома (в приближении самосогласованного поля). Т.к. все состояния являются вырожденными по квантовому числу  $m$  и по спину, то принято указывать только полное количество электронов, находящихся в состоянии с данными  $n, l$ .

Слева от числа  $l$  пишут число  $n$ , а сверху от числа  $l$  - число электронов в состоянии с данным  $n, l$ . Например  $2s^2$  соответствует двум электронам в состоянии с  $n = 2, l = 0$ . Из-за практического удобства в полной формуле электронной конфигурации термы пишут в порядке возрастания квантового числа  $n$ , а затем квантового числа  $l$ , например  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ . (Иногда формулу сокращают до  $1s^2 2s^2 p^6 3s^2 p^2$ , т.е. опускают число  $n$  там, где его можно угадать из правила упорядочения термов).

*Пример.*

Элемент		Терм основного состояния	Электронная конфигурация
H	Водород	$^2S_{1/2}$	$1s^1$
He	Гелий	$^1S_0$	$1s^2$
Li	Литий	$^2S_{1/2}$	$1s^2 2s$
Be	Бериллий	$^1S_0$	$1s^2 2s^2$
Ne	Неон	$^1S_0$	$1s^2 2s^2 2p^6$
Ar	Аргон	$^1S_0$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Fe	Железо	$^5D_4$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

*Валентная оболочка* - самая внешняя оболочка атома. Электроны этой оболочки часто называют валентными электронами, то есть электронами, определяющими поведение атома в химических реакциях. Хотя это и не совсем верно. Поведение атома в химических реакциях определяют электроны, обладающие большей энергией, то есть те электроны, которые расположены дальше от ядра. Электроны внутренних подуровней оболочек не всегда имеют меньшую энергию, чем электроны внешних подуровней. Например, электроны подуровня оболочки  $3d$  могут иметь энергию большую, чем электроны подуровня оболочки  $4s$ , что делает их *валентными электронами*.

С точки зрения химической активности, *наименее* активными считаются атомы, в которых валентная оболочка окончательно заполнена (инертные газы). Наибольшей химической активностью обладают атомы, в которых валентная оболочка состоит всего из одного электрона (щелочные металлы), и атомы, в которых одного электрона не хватает для окончательного заполнения оболочки (галогены).

### Периодическая система элементов.

Опыт показывает, что свойства атомов (и химические, и физические) зависят от зарядового числа, т.е. от количества протонов в ядре этого элемента. При этом по мере возрастания зарядового числа наблюдается повторяемость или периодичность свойств атомов. Это явление называется периодическим законом (химических) элементов. Чтобы показать повторяющиеся свойства (химических элементов), их упорядочивают в виде периодической таблицы (таблицы Менделеева).

*Периодическая система химических элементов (таблица Менделеева)* - классификация химических элементов, устанавливающая зависимость различных свойств элементов от заряда атомного ядра. Система является графическим выражением периодического закона, установленного русским химиком Д.И. Менделеевым в 1869 году. В современном варианте периодическая система представляет собой двумерную таблицу, в которой каждый столбец (группа) определяет основные физико-химические свойства, а строки представляют собой периоды, в определённой мере подобные друг другу.

Элементы с одинаковым числом *валентных* электронов формируют группу, которая изображается в таблице в виде столбца (движение по горизонтальному ряду соответствуют заполнению валентной оболочки электронами). Элементы, находящиеся в самом правом столбце таблицы, имеют полностью заполненную электронами внешнюю оболочку, поэтому они отличаются крайне низкой химической активностью и называются инертными или благородными газами.

Химические свойства атомов определяются конфигурацией электронной оболочки. Положение атома в таблице Менделеева определяется электрическим зарядом его ядра (то есть количеством протонов), в то время как количество нейтронов принципиально не влияет на химические свойства; при этом нейтронов в ядре, как правило, больше, чем протонов. Если атом находится в нейтральном состоянии, то количество электронов в нём равно количеству протонов.

### Структура периодической системы

Распространённые другие являются 3 формы таблицы Менделеева: «короткая» (короткопериодная), «длинная» (длиннопериодная) и «сверхдлинная». В «сверхдлинном» варианте каждый период занимает ровно одну строчку. В «длинном» варианте лантаноиды и актиноиды вынесены из общей таблицы, делая её более компактной. В «короткой» форме записи, в дополнение к этому, четвёртый и последующие периоды занимают по 2 строчки; символы элементов главных и побочных подгрупп выравниваются относительно разных краёв клеток.

Короткая форма таблицы, содержащая восемь групп элементов, с 1989 года не рекомендуется к использованию.

Существует и множество других, редко или вовсе не используемых способов графического отображения Периодического закона. На сегодня существуют несколько сотен вариантов таблицы, при этом непрестанно предлагаются всё новые варианты.

### Значение периодической системы.

Периодическая система Д.И.Менделеева стала важнейшей вехой в развитии атомно-молекулярного учения. Благодаря ей сложилось современное понятие о химическом элементе, были уточнены представления о простых веществах и соединениях.

Прогнозирующая роль периодической системы, показанная ещё самим Менделеевым, в XX веке проявилась в оценке химических свойств трансураниевых элементов.

Появление периодической системы открыло новую, подлинно научную эру в истории химии и ряде смежных наук - взамен разрозненных сведений об элементах и соединениях появилась стройная система, на основе которой стало возможным обобщать, делать выводы, предвидеть.



Группа 1

1a

1

H

1s

259.14

259.81

2.021

Водород

Hydrogen

2

Li

2s

379.48

379.87

0.980.97

Литий

Lithium

3

Be

2s

900.24

900.270

1.571.47

Бериллий

Beryllium

4

B

2s

801.07

801.107

0.931.01

Бор

Boron

5

C

2s

1086.1

1086.123

1.313.23

Углерод

Carbon

6

N

2s

1012.6

1012.610

1.001.04

Азот

Nitrogen

7

O

2s

1171.4

1171.467

0.820.91

Кислород

Oxygen

8

F

2s

1681.0

1681.067

0.850.99

Фтор

Fluorine

9

Ne

2s

2081.0

2081.101

1.221.11

Неон

Neon

10

Na

3s

495.8

495.872

0.950.99

Натрий

Sodium

11

Mg

3s

737.6

737.629

1.221.11

Магний

Magnesium

12

Al

3s

578.5

578.533

1.313.22

Алюминий

Aluminium

13

Si

3s

786.5

786.478

1.313.22

Кремний

Silicon

14

P

3s

1011.8

1011.818

1.313.22

Фосфор

Phosphorus

15

S

3s

1213.7

1213.701

1.313.22

Сера

Sulfur

16

Cl

3s

1591.3

1591.313

1.313.22

Хлор

Chlorine

17

Ar

3s

1791.3

1791.337

1.313.22

Аргон

Argon

18

K

4s

418.8

418.770

0.950.99

Калий

Potassium

19

Ca

4s

297.2

297.236

0.950.99

Кальций

Calcium

20

Sc

3d

1370.5

1370.501

1.313.22

Скандий

Scandium

21

Ti

3d

1344.3

1344.287

1.313.22

Титан

Titanium

22

V

3d

1520.6

1520.603

1.313.22

Ванадий

Vanadium

23

Cr

3d

1641.9

1641.891

1.313.22

Хром

Chromium

24

Mn

3d

1876.4

1876.383

1.313.22

Марганец

Manganese

25

Fe

3d

1886.8

1886.781

1.313.22

Железо

Iron

26

Co

3d

1891.3

1891.264

1.313.22

Кобальт

Cobalt

27

Ni

3d

1913.3

1913.274

1.313.22

Никель

Nickel

28

Cu

3d

1952.4

1952.368

1.313.22

Медь

Copper

29

Zn

3d

1980.1

1980.084

1.313.22

Цинк

Zinc

30

Ga

4s

2032.1

2032.041

1.313.22

Галлий

Gallium

31

Ge

4s

2086.4

2086.361

1.313.22

Германий

Germanium

32

As

4s

2149.6

2149.571

1.313.22

Мышьяк

Arsenic

33

Se

4s

2226.1

2226.085

1.313.22

Селен

Selenium

34

Br

4s

2344.6

2344.536

1.313.22

Бром

Bromine

35

Kr

4s

2415.0

2414.999

1.313.22

Криптон

Krypton

36

Rb

5s

402.2

402.181

0.950.99

Рубидий

Rubidium

37

Sr

5s

279.6

279.563

0.950.99

Стронций

Strontium

38

Y

4d

1312.0

1311.933

1.313.22

Иттрий

Yttrium

39

Zr

4d

1303.3

1303.254

1.313.22

Цирконий

Zirconium

40

Nb

4d

1492.1

1492.085

1.313.22

Нобий

Niobium

41

Mo

4d

1600.7

1600.633

1.313.22

Молибден

Molybdenum

42

Tc

4d

1679.6

1679.579

1.313.22

Технеций

Technetium

43

Ru

4d

1710.3

1710.241

1.313.22

Рутений

Ruthenium

44

Rh

4d

1761.6

1761.569

1.313.22

Родий

Rhodium

45

Pd

4d

1785.1

1785.014

1.313.22

Палладий

Palladium

46

Ag

4d

1870.4

1870.344

1.313.22

Серебро

Silver

47

Cd

4d

1912.2

1912.123

1.313.22

Кадмий

Cadmium

48

In

5s

2031.3

2031.264

1.313.22

Индий

Indium

49

Sn

5s

2066.3

2066.269

1.313.22

Олово

Sn

50

Pb

5s

2177.9

2177.897

1.313.22

Свинец

Lead

51

Bi

5s

2204.0

2203.972

1.313.22

Висмут

Bismuth

52

Po

5s

2230.1

2230.069

1.313.22

Полоний

Polonium

53

At

5s

2270.2

2270.176

1.313.22

Астат

Astatine

54

Fr

6s

402.2

402.187

0.950.99

Франций

Francium

55

Ra

6s

279.6

279.577

0.950.99

Радий

Radium

56

Ac

5d

1312.0

1311.933

1.313.22

Актиний

Actinium

57

Th

5d

1303.3

1303.254

1.313.22

Торий

Thorium

58

Pa

5d

1492.1

1492.085

1.313.22

Протактиний

Protactinium

59

U

5d

1600.7

1600.633

1.313.22

Уран

Uranium

60

Np

5d

1679.6

1679.579

1.313.22

Нептуний

Neptunium

61

Pu

5d

1710.3

1710.241

1.313.22

Плутоний

Plutonium

62

Am

5d

1761.6

1761.569

1.313.22

Америций

Americium

63

Cm

5d

1785.1

1785.014

1.313.22

Курций

Curium

64

Bk

5d

1870.4

1870.344

1.313.22

Беркелий

Berkelium

65

Cf

5d

1912.2

1912.123

1.313.22

Калифорний

Californium

66

Es

5d

1952.4

1952.368

1.313.22

Эйнштейний

Einsteinium

67

Fm

5d

1980.1

1980.084

1.313.22

Фермий

Fermium

68

Md

5d

1999.0

1998.941

1.313.22

Менделевий

Mendelevium

69

No

5d

2009.0

2008.932

1.313.22

Нобелий

Nobelium

70

Lr

5d

2015.0

2014.977

1.313.22

Лавренсий

Lawrencium

71

Lu

4f

1370.5

1370.474

1.313.22

Лютеций

Lutetium

72

Hf

4f

1344.3

1344.287

1.313.22

Гафний

Hafnium

73

Ta

4f

1312.0

1311.933

1.313.22

Тантал

Tantalum

74

W

4f

1286.1

1286.014

1.313.22

Вольфрам

Tungsten

75

Re

4f

1261.5

1261.467

1.313.22

Рений

Rhenium

76

Os

4f

1240.7

1240.689

1.313.22

Осмий

Osmium

77

Ir

4f

1218.1

1218.071

1.313.22

Иридий

Iridium

78

Pt

4f

1195.6

1195.569

1.313.22

Платина

Platinum

79

Au

4f

1163.7

1163.633

1.313.22

Золото

Gold

80

Hg

4f

1113.4

1113.368

1.313.22

Ртуть

Mercury

81

Tl

5s

2031.3

2031.264

1.313.22

Таллий

Thallium

82

Pb

5s

2066.3

2066.269

1.313.22

Свинец

Lead

83

Bi

5s

2204.0

2203.972

1.313.22

Висмут

Bismuth

84

Po

5s

2230.1

2230.069

1.313.22

Полоний

Polonium

85

At

5s

2270.2

2270.176

1.313.22

Астат

Astatine

86

Rn

5s

2180.9

2180.861

1.313.22

Радон

Radon

87

Fr

6s

402.2

402.187

0.950.99

Франций

Francium

88

Ra

6s

279.6

279.577

0.950.99

Радий

Radium

89

Ac

5d

1312.0

1311.933

1.313.22

Актиний

Actinium

90

Th

5d

1303.3

1303.254

1.313.22

Торий

Thorium

91

Pa

5d

1492.1

1492.085

1.313.22

Протактиний

Protactinium

92

U

5d

1600.7

1600.633

1.313.22

Уран

Uranium

93

Np

5d

1679.6

1679.579

1.313.22

Нептуний

Neptunium

94

Pu

5d

1710.3

1710.241

1.313.22

Плутоний

Plutonium

95

Am

5d

1761.6

1761.569

1.313.22

Америций

Americium

96

Cm

5d

1785.1

1785.014

1.313.22

Курций

Curium

97

Bk

5d

1870.4

1870.344

1.313.22

Беркелий

Berkelium

98

Cf

5d

1912.2

1912.123

1.313.22

Калифорний

Californium

99

Es

5d

1952.4

1952.368

1.313.22

Эйнштейний

Einsteinium

100

Fm

5d

1980.1

1980.084

1.313.22

Фермий

Fermium

101

Md

5d

1999.0

1998.941

1.313.22

Менделевий

Mendelevium

102

No

5d

2009.0

2008.932

1.313.22

Нобелий

Nobelium

103

Lr

5d

2015.0

2014.977

1.313.22

Лавренсий

Lawrencium

104

Lu

4f

1370.5

1370.474

1.313.22

Лютеций

Lutetium

105

Hf

4f

1344.3

1344.287

1.313.22

Гафний

Hafnium

106

Ta

4f

1312.0

1311.933

1.313.22

Тантал

Tantalum

107

W

4f

1286.1

1286.014

1.313.22

Вольфрам

Tungsten

108

Re

4f

1261.5

1261.467

1.313.22

Рений

Rhenium

109

Os

4f

1240.7

1240.689

1.313.22

Осмий

Osmium

110

Ir

4f

1218.1

1218.071

1.313.22

Иридий

Iridium

111

Pt

4f

1195.6

1195.569

1.313.22

Платина

Platinum

112

Au

4f

1163.7

1163.633

1.313.22

Золото

Gold

113

Hg

4f

1113.4

1113.368

1.313.22

Ртуть

Mercury

114

Tl

5s

2031.3

2031.264

1.313.22

Таллий

Thallium

115

Pb

5s

2066.3

2066.269

1.313.22

Свинец

Lead

116

Bi

5s

2204.0

2203.972

1.313.22

Висмут

Bismuth

117

Po

5s

2230.1

2230.069

1.313.22

Полоний

Polonium

118

At

5s

2270.2

2270.176

1.313.22

Астат

Astatine

119

Rn

5s

2180.9

2180.861

1.313.22

Радон

Radon

120

Fr

6s

402.2

402.187

0.950.99

Франций

Francium

121

Ra

6s

279.6

279.577

0.950.99

Радий

Radium

122

Ac

5d

1312.0

1311.933

1.313.22

Актиний

Actinium

123

Th

5d

1303.3

1303.254

1.313.22

Торий

Thorium

124

Pa

5d

1492.1

1492.085

1.313.22

Протактиний

Protactinium

125

U

5d

1600.7

1600.633

1.313.22

Уран

Uranium

126

Np

5d

1679.6

1679.579

1.313.22

Нептуний

Neptunium

127

Pu

5d

1710.3

1710.241

1.313.22

Плутоний

Plutonium

128

Am

5d

1761.6

1761.569

1.313.22

Америций

Americium

129

Cm

5d

1785.1

1785.014

1.313.22

Курций

Curium

130

Bk

5d

1870.4

1870.344

1.313.22

Беркелий

Berkelium

131

Cf

5d

1912.2

1912.123

1.313.22

Калифорний

Californium

132

Es

5d

1952.4

1952.368

1.313.22

Эйнштейний

Einsteinium

133

Fm

5d

1980.1

1980.084

1.313.22

Фермий

Fermium

134

Md

5d

1999.0

1998.941

1.313.22

Менделевий

Mendelevium

135

No

5d

2009.0

2008.932

1.313.22

Нобелий

Nobelium

136

Lr

5d

2015.0

2014.977

1.313.22

Лавренсий

Lawrencium

137

Lu

4f

1370.5

1370.474

1.313.22

Лютеций

Lutetium

138

Hf

4f

1344.3

1344.287

1.313.22

Гафний

Hafnium

139

Ta

4f

1312.0

1311.933

1.313.22

Тантал

Tantalum

140

W

4f

1286.1

1286.014

1.313.22

Вольфрам

Tungsten

141

Re

4f

1261.5

1261.467

1.313.22

Рений

Rhenium

142

Os

4f

1240.7

1240.689

1.313.22

Осмий

Osmium

143

Ir

4f

1218.1

1218.071

1.313.22

Иридий

Iridium

144

Pt

4f

1195.6

1195.569

1.313.22

Платина

Platinum

145

Au

4f

1163.7

1163.633

1.313.22

Золото

Gold

146

Hg

4f

1113.4

1113.368

1.313.22

Ртуть

Mercury

147

Tl

5s

2031.3

2031.264

1.313.22

Таллий

Thallium

148

Pb

5s

2066.3

2066.269

1.313.22

Свинец

Lead

149

Bi

5s

2204.0

2203.972

1.313.22

Висмут

Bismuth

150

Po

5s

2230.1

2230.069

1.313.22

Полоний

Polonium

151

At

5s

2270.2

2270.176

1.313.22

Астат

Astatine

152

Rn

5s

2180.9

2180.861

1.313.22

Радон

Radon

153

Fr

6s

402.2

402.187

0.950.99

Франций

Francium

154

Ra

6s

279.6

279.577

0.950.99

Радий

Radium

155

Ac

5d

1312.0

1311.933

1.313.22

Актиний

Actinium

156

Th

5d

1303.3

1303.254

1.313.22

Торий

Thorium

157

Pa

5d

1492.1

1492.085

1.313.22

Протактиний

Protactinium

158

U

5d

1600.7

1600.633

1.313.22

Уран

Uranium

159

Np

5d

1679.6

1679.579

1.313.22

Нептуний

Neptunium

160

Pu

5d

1710.3

1710.241

1.313.22

Плутоний

Plutonium

161

Am

5d

1761.6

1761.569

1.313.22

Америций

Americium

162

Cm

5d

1785.1

## Лекции 14 - 15. Квантовые статистические распределения.

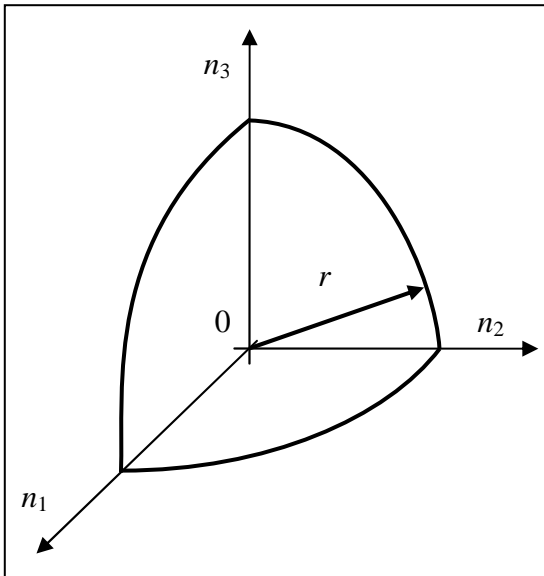
*Плотность квантовых состояний. Распределение Ферми - Дирака. Функция распределения частиц по энергиям. Энергия Ферми. Вырожденный электронный газ, температура вырождения. Распределение Бозе - Эйнштейна. Фотоны и фононы. Вывод формулы Планка из квантовой статистики Бозе - Эйнштейна.*

## Плотность квантовых состояний.

Энергия электрона, находящегося в трехмерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками, описывается выражением

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e} \left( \left( \frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left( \frac{n_2}{a_2} \right)^2 + \left( \frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right)$$

где  $a_1, a_2, a_3$  – длины сторон прямоугольной ямы. Энергия электрона меняется не непрерывно, а дискретно, т.к. числа  $n_1, n_2, n_3$  могут принимать только целочисленные значения. Однако, если энергия частицы существенно больше энергии основного состояния, то разница между значениями соседних уровней энергии  $\Delta E$  значительно меньше самого значения энергии  $\Delta E \ll E$ , тогда можно считать, что энергия электрона меняется практически непрерывно (квазинепрерывно).



Введём трехмерное пространство, вдоль трех взаимно перпендикулярных осей которого отложены квантовые числа  $n_1, n_2, n_3$  (пространство квантовых чисел). Точка этого пространства координата которой задаётся набором целым чисел  $(n_1, n_2, n_3)$  называется *узлом*. Каждому узлу в пространстве квантовых чисел соответствует определенное значение энергии. Одному значению энергии электрона может соответствовать несколько состояний (например, отличающимся проекциями спина электрона  $\pm \frac{1}{2}$ ). Узлу можно сопоставить элементарный кубик с единичной длиной рёбер  $\Delta n_1 = \Delta n_2 = \Delta n_3 = 1$ , так что объём этого куба равен единице  $\Delta V = \Delta n_1 \cdot \Delta n_2 \cdot \Delta n_3 = 1$ .

Пусть  $N$  – количество узлов, в которых энергия электрона превышает некоторое фиксированного значения  $E$ . Если ввести обозначение

$$r^2 = \frac{(n_1 a_2 a_3)^2 + (a_1 n_2 a_3)^2 + (a_1 a_2 n_3)^2}{(a_1 a_2 a_3)^{4/3}}, \text{ то выражение для энергии примет вид } E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e (a_1 a_2 a_3)^{2/3}} r^2,$$

откуда  $r = \frac{(a_1 a_2 a_3)^{1/3}}{\pi \hbar} \sqrt{2m_e E}$ . Тогда число узлов  $N$  равно отношению объёмов этой восьмой части сферы соответствующего радиуса (в которой все три координаты неотрицательные  $\{n_1 > 0, n_2 > 0, n_3 > 0\}$  (т.е. в одной восьмой части сферы)) к объёму элементарного кубика

$$N = \frac{1}{8} \frac{V_{сф}}{\Delta V} = \frac{1}{8} \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{\Delta V} = \frac{1}{6} \pi \frac{a_1 a_2 a_3}{\pi^3 \hbar^3} (2m_e E)^{3/2}.$$

Учтём, что объём потенциальной ямы (в обычном пространстве) равен  $V = a_1 a_2 a_3$ , а

$p = \sqrt{2m_e E}$  – величина (нерелятивистского) импульса. Поэтому

$$N = \frac{1}{6} \pi \frac{V p^3}{\pi^3 \hbar^3} = \frac{2^3}{6} \pi \frac{V p^3}{2^3 \pi^3 \hbar^3} = \frac{4}{3} \pi V p^3 \frac{1}{(2\pi \hbar)^3}.$$

Теперь рассмотрим *фазовое пространство*, каждая точка в котором задаётся 6-ю координатами – это три пространственные координаты и три проекции импульса  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ . Частица, находящаяся в потенциальной яме, в состояниях, энергия которых не превышает некоторое значение  $E$ , движется в некоторой области 6-ти мерного фазового пространства.

Т.к. величина импульса частицы не превосходит величины  $p = \sqrt{2m_e E}$ , то в импульсной части фазового пространства  $(p_x, p_y, p_z)$  эта область задается соотношением  $p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \leq p^2$  - т.е. является шаром радиуса  $p$ , объём которого  $V_p = \frac{4}{3}\pi p^3$ . Поэтому полная область в 6-ти мерном фазовом пространстве является *прямым произведением* прямоугольной трёхмерной ямы в обычном пространстве и шара в импульсном пространстве. Следовательно, величина объёма общей области в фазовом пространстве равна  $V_{\text{фаз}} = V \cdot \frac{4}{3}\pi p^3$ . Тогда общее количество узлов равно  $N = \frac{V_{\text{фаз}}}{(2\pi\hbar)^3}$ .

Обозначим возможное количество состояний, приходящихся на один узел как  $q_s$ . Например, для электрона  $q_s = 2$ , т.к. возможны два состояния с одинаковым набором квантовых чисел, но различающиеся проекциями спина. Тогда общее число состояний со значением энергии не больше  $E$ , равно произведению  $G = N \cdot q_s = \frac{V_{\text{фаз}}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot q_s$ ,

*Замечание.* Минимальное количество квантовых состояний равно (при  $q_s = 1$ )  $G_0 = \frac{V_{\text{фаз}}}{(2\pi\hbar)^3}$ . Тогда элементарный объём фазового пространства, приходящийся на одно квантовое состояние можно определить как отношение фазового объёма к количеству состояний

$\Delta V_{\text{фаз}} = \frac{V_{\text{фаз}}}{G_0} = (2\pi\hbar)^3$ . Учитывая соотношения неопределенностей Гейзенберга для координат и проекций импульсов, записанные в виде  $\Delta x \cdot \Delta p_x = 2\pi\hbar$ ,  $\Delta y \cdot \Delta p_y = 2\pi\hbar$ ,  $\Delta z \cdot \Delta p_z = 2\pi\hbar$  получаем выражение для элементарного объёма фазового пространства, соответствующего одному квантовому состоянию  $(2\pi\hbar)^3 = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \Delta V_{\text{фаз}}$ .

В общем случае для количества состояний справедливо соотношение  $G = \frac{V_{\text{фаз}}}{\Delta V_{\text{фаз}}} q_s$ .

*Плотностью квантовых состояний* называется такая функция  $g(E)$ , зависящая от энергии, что количество квантовых состояний, энергия которых не превышает значения  $E_0$ , определяется равенством  $G(E_0) = \int_0^{E_0} g(E) dE$ , т.е.  $g(E) = \frac{dG(E)}{dE}$ .

Т.к. можно записать  $g(E) = \frac{dG(E)}{dp} \frac{dp}{dE}$ , то в рассматриваемом случае получаем равенство

$$g(E) = \frac{dG}{dE} = \frac{dp}{dE} \frac{d}{dp} \left( \frac{4}{3} \pi V p^3 \frac{q_s}{(2\pi\hbar)^3} \right) = q_s \frac{V 4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE}.$$

Оказывается, что полученное выражение  $g(E) = q_s \frac{V 4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dp}{dE}$  справедливо для любых частиц.

*Пример.*

1) Для электронов  $q_s = 2$  и  $p = \sqrt{2m_e E}$ , тогда  $\frac{dp}{dE} = \sqrt{\frac{m_e}{2E}}$ , поэтому

$$g(E) = 2 \frac{V 4\pi 2m_e E}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{m_e}{2E}} = \frac{\sqrt{2} (m_e)^{3/2} \sqrt{E}}{\pi^2 \hbar^3} V.$$

2) Для фотонов можно считать, что  $q_s = 2$ , что соответствует двум независимым направлениям

поляризации э/м волны. Т.к.  $p = \frac{E}{c}$ , то  $\frac{dp}{dE} = \frac{1}{c}$ . Поэтому  $g(E) = 2 \frac{V 4\pi \left(\frac{E}{c}\right)^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{c} = \frac{E^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} V$ . ♣

### Распределение Бозе-Эйнштейна

В классической физике распределение частиц по энергиям в фазовом пространстве описывается распределением Максвелла-Больцмана  $dN = A \cdot e^{-\frac{E_k + U}{kT}} dp_x dp_y dp_z dx dy dz$ , где  $E_k$  и  $U$  - кинетическая и потенциальная энергии частицы,  $T$  - температура,  $k$  - постоянная Больцмана,  $A$  - нормировочный коэффициент.

Для вывода статистических распределений необходимо найти наиболее вероятное распределение частиц, т.е. распределение, которое может быть реализовано наибольшим числом способов. По основному постулату статистической физики именно это распределение и является равновесным.

Предположим, что частицы не взаимодействуют друг с другом (модель идеального газа), а также, что все распределения, которые приводят к одной и той же суммарной энергии частиц, реализуются с одинаковой вероятностью.

Рассмотрим систему, состоящую из двух частиц. Пусть число возможных состояний, в которых может находиться каждая из частиц, равно трём.

По классическим представлениям две частицы всегда различимы. Присвоим частицам номера 1 и 2. Если в каком-то состоянии частицы переставить просто местами, то получится новое состояние. Поэтому общее число состояний системы равно 9.

В квантовой механике тождественные частицы принципиально неразличимы. При перестановке местами тождественных частиц состояние системы не меняется. Поэтому занумеровывать частицы нельзя. Если в одном состоянии может находиться только один фермион, то для бозонов никаких ограничений нет. Поэтому число состояний системы из бозонов равно 6, а из фермионов равно – 3.

Распределение классических частиц			1	2		2	1		12		
				1	2		2	1		12	
			1		2	2		1			12
Распределение бозонов	•	•		••			•	•			
		•	•		••			•	•		
	•		•			••			•		
Распределение фермионов	•	•					•	•			
		•	•					•	•		
	•		•						•	•	

### Распределение Бозе-Эйнштейна.

Рассмотрим следующую вспомогательную задачу. Пусть имеется длинный пенал, который может быть разделен на  $Z$  ячеек с помощью  $(Z-1)$  перегородок. Найдем число способов размещения  $N$  неразличимых частиц по ячейкам. В каждой ячейке может находиться произвольное число частиц бозе-частиц. Будем считать, что система состоит из  $N$  частиц и  $(Z-1)$  пере-



городок, т.е. всего из  $N+Z-1$  элементов. Общее число перестановок в системе из  $N+Z-1$  элементов, равно  $(N+Z-1)!$ . Однако перестановки частиц (из-за их неразличимости) ничего не меняют. Число таких перестановок равно  $N!$ . Перестановки только перегородок тоже не приводят к новым распределениям, их число равно  $(Z-1)!$ . Таким образом, число способов  $\Omega$ , с помощью которых  $N$  тождественных частиц могут быть распределены по  $Z$  ячейкам, равно

$$\Omega = \frac{(N+Z-1)!}{N!(Z-1)!}.$$

Это выражение определяет число способов, с помощью которых  $N$  бозонов могут быть распределены по  $Z$  состояниям. Каждый способ размещения частиц представляет собой определенное *микросостояние системы*. Следовательно,  $\Omega$  - это число микросостояний, с помощью которых реализуется конкретное *макросостояние системы*. Т.е.  $\Omega$  - это *термодинамическая вероятность* или *статистический вес* макросостояния системы.

В шестимерном фазовом пространстве уравнение  $f(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = E = \text{const}$ , где  $E$  - энергия частицы, определяет *изоэнергетическую* поверхность, т.е. поверхность, все точки которой отвечают одному и тому же значению энергии частицы.

Слой с номером  $i$  между двумя поверхностями

$$f(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = E_i \text{ и } f(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = E_{i+1}$$

будет тонким, если  $|E_{i+1} - E_i| \ll E_i$ . В этом случае энергию всех частиц, попадающих в  $i$ -й слой, можно считать одинаковой и равной  $E_i$ . Пусть число квантовых состояний для этого слоя равно  $Z_i$ , а количество частиц в пределах  $i$ -го слоя равно  $N_i$ . Тогда статистический вес подсистемы, содержащей  $N_i$  частиц, равен

$$\Omega_i = \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}.$$

Статистический вес всей системы равен произведению статистических весов отдельных ее подсистем  $\Omega = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}$ .

Надо найти распределение, которое может быть реализовано наибольшим числом способов, т.е. распределение, для которого статистический вес  $\Omega$  максимален. Т.е. нужно найти максимум выражения  $\Omega = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}$  при заданном числе частиц системы  $N = \sum_i N_i$  и полной энергии системы  $E = \sum_i N_i E_i$ .

Вместо поиска экстремума выражения  $\Omega_i = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}$  будем искать максимум энтропии  $S$ , которая связана со статистическим весом соотношением Больцмана  $S = k \cdot \ln \Omega$ :

$$S = k \cdot \ln \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!} = k \cdot \sum_i \left[ \ln \{(N_i + Z_i - 1)!\} - \ln \{N_i!\} - \ln \{(Z_i - 1)!\} \right].$$

Для дальнейших преобразований воспользуемся *формулой Стирлинга*, согласно которой при  $n \gg 1$   $\ln \{n!\} \approx n \ln(n) - n$ . При  $N_i \gg 1$  и  $Z_i \gg 1$  получаем

$$S = k \cdot \sum_i \left[ (N_i + Z_i - 1) \ln(N_i + Z_i - 1) - (N_i + Z_i - 1) - N_i \ln N_i + N_i - (Z_i - 1) \ln(Z_i - 1) + (Z_i - 1) \right]$$

или  $S = k \cdot \sum_i \left[ (N_i + Z_i - 1) \ln(N_i + Z_i - 1) - N_i \ln N_i \right] + C$ , где величина  $C = -k \sum_i (Z_i - 1) \ln(Z_i - 1)$  - не зависит от числа частиц  $N_i$ .

Чтобы найти максимум энтропии для заданного числа частиц системы  $N$  и энергии  $E$ , применяем метод множителей Лагранжа, согласно которому необходимо построить вспомогательную функцию  $F = S + \lambda_1 N + \lambda_2 E$  (где  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  – постоянные множители) и найти её экстремум:  $F = k \cdot \sum_i [(N_i + Z_i - 1) \ln(N_i + Z_i - 1) - N_i \ln N_i] + C + \lambda_1 \sum_i N_i + \lambda_2 \sum_i N_i E_i$ .

Необходимые условия экстремума  $\frac{\partial F}{\partial N_i} = 0$  имеют вид

$$\frac{\partial F}{\partial N_i} = k \cdot \left[ \ln(N_i + Z_i - 1) + (N_i + Z_i - 1) \frac{1}{(N_i + Z_i - 1)} - \ln N_i - N_i \frac{1}{N_i} \right] + \lambda_1 + \lambda_2 E_i = 0$$

или

$$\frac{N_i + Z_i - 1}{N_i} = e^{-\frac{\lambda_1 + \lambda_2 E_i}{k}}, \text{ откуда } \frac{\frac{N_i}{Z_i} + 1 - \frac{1}{Z_i}}{\left(\frac{N_i}{Z_i}\right)} = e^{-\frac{\lambda_1 + \lambda_2 E_i}{k}}.$$

Отношение  $\frac{N_i}{Z_i} = \langle n_i \rangle$  представляет собой среднее число частиц, приходящихся на одну ячейку фазового пространства, т.е. на одно состояние в  $i$ -ом энергетическом слое.

Поскольку  $Z_i \gg 1$ , то слагаемым в числителе  $\frac{1}{Z_i} \ll 1$  можно пренебречь. Таким образом, для  $\langle n_i \rangle$  получаем

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\lambda_1 + \lambda_2 E_i}{k}} - 1}.$$

Найдем множители Лагранжа  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Т.к. все частные производные функции  $F$  равны нулю, то это означает, что равен нулю дифференциал этой функции  $dF$ , т.е.  $dF = dS + \lambda_1 dN + \lambda_2 dE = 0$ .

Но так как число частиц системы  $N$  постоянно, то  $dN=0$  и, поэтому  $dS = -\lambda_2 dE$ .

Предположим теперь, что рассматриваемая система получает в обратимом процессе некоторое количество теплоты  $\delta Q$  при неизменном объеме  $V$ . Поэтому изменение энтропии системы равно  $dS = \frac{\delta Q}{T}$ . Поскольку  $V = \text{const}$ , то  $\delta A = 0$  и  $\delta Q = dE$ , следовательно,  $dS = \frac{dE}{T}$  откуда

$$\lambda_2 = -\frac{1}{T}.$$

Множитель  $\lambda_1$  запишем в виде  $\lambda_1 = \frac{\mu}{T}$ , где  $\mu$  – некоторая функция параметров состояния системы, в частности, температуры. Эту функцию называют *химическим потенциалом*. С учетом выражений для  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  выражение для  $\langle n_i \rangle$  принимает вид  $\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} - 1}$ .

Освобождаясь от индекса  $i$ , окончательно получаем распределение Бозе-Эйнштейна

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} - 1}.$$

Оно описывает распределение бозе-частиц по энергиям и определяет среднее число бозе-частиц  $\langle n \rangle$ , находящихся в квантовом состоянии с энергией  $E$ . Величину  $\langle n \rangle$  называют также *числом заполнения* энергетического уровня с энергией  $E$ .

Как следует из распределения Бозе-Эйнштейна, число бозе-частиц, находящихся на одном энергетическом уровне (в одном состоянии), ничем не ограничено и при малых значениях

параметра  $\frac{E-\mu}{kT}$  может оказаться очень большим. Это важная отличительная особенность бозе-частиц.

*Замечание.* Химический потенциал  $\mu$  для систем бозонов с постоянным числом частиц  $N$  может принимать только отрицательные значения, т.е.  $\mu < 0$ . Действительно, если бы  $\mu$  мог быть положительным, то при  $E < \mu$  экспонента в знаменателе была бы меньше единицы  $e^{\frac{E-\mu}{kT}} < 1$  и соответствующие числа заполнения  $\langle n \rangle$  стали бы отрицательными, что невозможно.

Рассмотрим случай малых чисел заполнения  $\langle n \rangle \ll 1$ . Это условие выполняется при  $e^{\frac{E-\mu}{kT}} \gg 1$ , или  $\frac{E-\mu}{kT} \gg 1$ . Пренебрегая единицей по сравнению с экспонентой в знаменателе  $\langle n \rangle \approx \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}}} = A \cdot e^{-\frac{E}{kT}}$ , где  $A = e^{\frac{\mu}{kT}}$ . Мы видим, что при малых числах заполнения, или, как говорят, в случае *разреженного бозе-газа*, распределение Бозе-Эйнштейна переходит в классическое распределение Больцмана.

Газ, свойства которого отличаются от свойств классического идеального газа, называется *вырожденным газом*. Поскольку распределение Бозе-Эйнштейна существенно образом отличается от распределения Больцмана, то газ бозонов является *вырожденным газом*. И только в случае малой плотности ( $\langle n \rangle \ll 1$ ) вырождение снимается и разреженный бозе-газ ведет себя подобно идеальному газу.

Число бозонов, находящихся на одном энергетическом уровне, может быть очень большим. Кроме того, при определенных условиях в системе бозе-частиц может происходить бозе-конденсация - скопление очень большого числа частиц в состоянии с энергией  $E=0$ . Именно с бозе-конденсацией связаны такие явления, как *сверхтекучесть* и *сверхпроводимость*.

Распределение Бозе-Эйнштейна используется для описания свойств систем, состоящих из бозе-частиц: как простых, например, фотонов, фононов, так и более сложных, составных, например, атомов  $^4\text{He}$ , электронов, образующих куперовские пары, и т.д. С его помощью описываются свойства теплового излучения, теплоемкость кристаллов и многие другие физические явления. Что же касается поведения обычных газов, атомы которых являются бозе-частицами, то анализ показывает, что при нормальных температурах и давлениях эти газы не являются вырожденными и подчиняются классической статистике. Вырождение наступает либо при очень низких температурах, либо при очень высоких давлениях, т.е. при тех условиях, при которых газы перестают быть идеальными. Таким образом, для этих газов статистика Бозе-Эйнштейна в той области, в которой справедлива кинетическая теория газов, практически не отличается от классической статистики Больцмана.

#### Случай переменного числа частиц.

При выводе распределения Бозе-Эйнштейна число частиц системы  $N$  оставалось постоянным. Какой вид имеет распределение Бозе-Эйнштейна для системы с переменным числом частиц? Примером такой системы является тепловое излучение внутри замкнутой полости. Стенки полости непрерывно поглощают и испускают излучение, поэтому число фотонов внутри полости постоянно меняется. Фотоны являются бозе-частицами и при не очень сильных (нелазерных) интенсивностях излучения не взаимодействуют друг с другом. Так что излучение в замкнутой полости представляет собой идеальный бозе-газ фотонов с переменным числом частиц.

Рассматриваем систему бозонов с переменным числом частиц  $N$ . Решаем задачу так же как и выше. Поскольку в данном случае  $\sum_i N_i = N \neq \text{const}$  то при нахождении условного экстремума энтропии  $S$  методом множителей Лагранжа вместо функции  $F = S + \lambda_1 N + \lambda_2 E$  следует

взять функцию  $F = S + \lambda_2 E$  (исчезло условие постоянства числа частиц системы). Поэтому соответствующий множитель Лагранжа следует считать  $\lambda_1 = 0$ . В силу того, что химический потенциал  $\mu$  и множитель  $\lambda_1$  связаны соотношением  $\mu = \lambda_1 T$ , получаем, что и  $\mu = 0$ . Таким образом, химический потенциал системы бозонов с переменным числом частиц равен нулю и распределение Бозе-Эйнштейна для систем с переменным числом частиц принимает вид  $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1}$ .

*Пример.* Получим формулу Планка для равновесного теплового излучения из распределения Бозе-Эйнштейна.

Рассмотрим излучение, находящееся внутри замкнутой полости, стенки которой нагреты до некоторой температуры  $T$ . Это излучение представляет собой идеальный газ фотонов. Поскольку для фотонов  $E = \hbar\omega$ , то  $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$ .

Энергия излучения в узком энергетическом интервале от  $E$  до  $E+dE$  складывается из энергий отдельных фотонов. Плотность квантовых состояний  $g(E)$ , т.е. число состояний, приходящихся на единичный энергетический интервал, для фотонов определяется выражением

$g(E) = \frac{E^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} V$ . Произведение  $g(E)$  на  $dE$  дает число квантовых состояний, заключенных внутри интервала  $dE$ . Умножая это произведение на среднее число фотонов в данном состоянии  $\langle n \rangle$  и на энергию фотона  $E$ , получаем, что суммарная энергия фотонов в интервале  $dE$  равна  $\langle n \rangle \cdot g(E) \cdot E dE$ .

Данному энергетическому интервалу от  $E$  до  $E+dE$  соответствует частотный интервал частот от  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  до  $\omega + d\omega = \frac{E}{\hbar} + \frac{dE}{\hbar}$ .

Спектральная плотность объёмной плотности энергии  $u_{\omega,T}$  представляет собой энергию излучения в единичном частотном интервале, отнесенную к единице объема. Т.к. энергия фотонов в частотном интервале  $d\omega$  равна  $u_{\omega,T} \cdot V \cdot d\omega$ , ( $V$  - объем полости), то

$$u_{\omega,T} \cdot V \cdot d\omega = \langle n \rangle \cdot g(E) \cdot E dE \text{ или } u_{\omega,T} \cdot V \cdot \frac{dE}{\hbar} = \frac{E^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} V \cdot E dE \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1},$$

$$\text{откуда } u_{\omega,T} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

### Распределение Ферми-Дирака

Найдем распределение ферми-частиц, т.е. частиц, обладающих полуцелым спином. Ферми-частицы подчиняются принципу (запрету) Паули, согласно которому в одном и том же состоянии одновременно не может находиться более одного фермиона. Т.е. можно сказать, что фермионы являются частицами-индивидуалистами. Рассмотрим идеальный ферми-газ, т.е. систему, состоящую из невзаимодействующих фермионов.

Сначала найдем число возможных распределений  $N$  частиц по  $Z$  ячейкам пенала при условии, что в каждой ячейке не может находиться более одной частицы. Число ячеек  $Z$  и число частиц  $N$  должны удовлетворять условию  $Z \geq N$ .

Число всевозможных перестановок пустых ячеек пенала и ячеек с частицами равно  $Z!$ . При этом перестановки только ячеек с частицами в силу тождественности частиц не приводят к новым распределениям. Число таких перестановок равно  $N!$ . Перестановки местами пустых ячеек тоже не дают новых распределений, их число равно  $(Z-N)!$ . Таким образом, число различных распределений  $N$  частиц по  $Z$  ячейкам в данном случае равно

$$\Omega = \frac{Z!}{N!(Z-N)!}.$$

Это выражение определяет число возможных распределений  $N$  фермионов по  $Z$  ячейкам, т.е. статистический вес макросостояния системы фермионов.

Вывод статистического распределения, которому подчиняются ферми-частицы, проводится также как и для бозе-частиц.

В шестимерном фазовом пространстве с координатами  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$  две изоэнергетические поверхности  $f(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = E_i = \text{const}$  и  $f(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = E_{i+1} = \text{const}$  выделяют тонкие энергетические слои. Опять предполагаем, что  $|E_{i+1} - E_i| \ll E_i$ . Пусть в  $i$ -ом слое имеется  $Z_i$  ячеек и  $N_i$  частиц. Тогда статистический вес подсистемы из  $N_i$  частиц есть

$\Omega_i = \frac{Z_i!}{N_i!(Z_i - N_i)!}$ . Статистический вес всей системы равен произведению статистических весов ее отдельных подсистем

$$\Omega = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{Z_i!}{N_i!(Z_i - N_i)!}.$$

Для того чтобы найти наиболее вероятное распределение частиц по ячейкам, нужно найти максимум статистического веса при условии, что полное число частиц системы  $N$  и полная энергия системы  $E$  остаются постоянными, т.е.  $N = \sum_i N_i = \text{const}$  и  $E = \sum_i N_i E_i = \text{const}$ .

Как и для бозе-частиц, вместо максимума статистического веса  $\Omega$  будем искать максимум энтропии  $S = k \cdot \ln \Omega$ :

$$S = k \cdot \ln \prod_i \frac{Z_i!}{N_i!(Z_i - N_i)!} = k \cdot \sum_i [\ln \{Z_i!\} - \ln \{N_i!\} - \ln \{(Z_i - N_i)!\}].$$

Используем формулу Стирлинга  $\ln \{n!\} \approx n \ln(n) - n$ , которая справедлива при  $n \gg 1$ . Поэтому при  $Z_i \gg 1$  и  $N_i \gg 1$ , выполняется

$$S = k \cdot \sum_i [Z_i \ln Z_i - Z_i - N_i \ln N_i + N_i - (Z_i - N_i) \ln (Z_i - N_i) + (Z_i - N_i)] \text{ или}$$

$$S = k \cdot \sum_i [Z_i \ln Z_i - N_i \ln N_i - Z_i \ln (Z_i - N_i) + N_i \ln (Z_i - N_i)].$$

$$S = C - k \cdot \sum_i [N_i \ln N_i + (Z_i - N_i) \ln (Z_i - N_i)], \text{ где } C = k \cdot \sum_i Z_i \ln Z_i$$

Слагаемое  $C$  можно в дальнейшем не учитывать, поскольку при решении задачи на экстремум энтропии  $S$  варьироваться будут только числа частиц в слое  $N_i$ , а  $C$  от них не зависит.

Для отыскания максимума энтропии используем метод множителей Лагранжа. Рассмотрим функцию  $F = S + \lambda_1 N + \lambda_2 E$

$$F = C - k \cdot \sum_i [N_i \ln N_i + (Z_i - N_i) \ln (Z_i - N_i)] + \lambda_1 \sum_i N_i + \lambda_2 \sum_i N_i E_i$$

где  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  - множители Лагранжа. Равенство нулю частных производных этой функции по  $N_i$ :

$$\frac{\partial F}{\partial N_i} = -k \cdot [\ln N_i + 1 - \ln (Z_i - N_i) - 1] + \lambda_1 + \lambda_2 E_i = 0, \text{ откуда } \frac{1 - \frac{N_i}{Z_i}}{\frac{N_i}{Z_i}} = e^{\frac{\lambda_1 + \lambda_2 E_i}{k}}.$$

Отношение  $\langle n_i \rangle = \frac{N_i}{Z_i}$  представляет собой среднее число ферми-частиц, приходящихся на

одну ячейку, т.е. на одно квантовое состояние:  $\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\lambda_1 + \lambda_2 E_i}{k}} + 1}$ .

Множители Лагранжа  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  находятся точно также как и в случае бозе-частиц.

$\lambda_2 = -\frac{1}{T}$ ,  $\lambda_1 = \frac{\mu}{T}$ , где  $\mu$  - химический потенциал. Тогда  $\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} + 1}$ .

Освобождаясь от индекса  $i$ , приходим к окончательному выражению  $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1}$ .

Это соотношение называется *распределением Ферми-Дирака*. Оно определяет среднее число ферми-частиц, находящихся в квантовом состоянии с энергией  $E$ .

Следствия из распределения Ферми-Дирака.

1.  $\langle n \rangle$  не может быть больше единицы. Это означает, что в одном квантовом состоянии не может находиться более одной ферми-частицы, что согласуется с принципом Паули. Поскольку  $\langle n \rangle \leq 1$ , то говорят, что распределение Ферми-Дирака определяет вероятность заполнения энергетического уровня с энергией  $E$  при температуре  $T$ .

2. Химический потенциал  $\mu$  для ферми-частиц может быть только положительным, т.е.  $\mu > 0$ . Иначе при  $T \rightarrow 0$  экспонента в знаменателе обратилась бы в бесконечность, а числа заполнения - в нуль, чего быть не может.

Рассмотрим случай малых чисел заполнения, т.е.  $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1} \ll 1$ . Это условие выпол-

няется при  $e^{\frac{E - \mu}{kT}} \gg 1$ , тогда  $\langle n \rangle \approx e^{-\frac{E - \mu}{kT}} = A \cdot e^{-\frac{E}{kT}}$ , где  $A = e^{\frac{\mu}{kT}}$ . Т.е. распределение Ферми-Дирака при малых числах заполнения, или, как говорят, в случае *разреженного ферми-газа*, переходит в классическое распределение Больцмана. Т.к. в распределение Больцмана в случае малых чисел заполнения переходит также и распределение Бозе-Эйнштейна, то можно сделать вывод, что *разреженные квантовые газы (и в случае бозонов, и в случае фермионов) не являются вырожденными и подчиняются классической статистике*.

Принципиальное различие между распределения Ферми-Дирака и Больцмана наблюдается при  $\frac{E - \mu}{kT} < 1$ . Классические частицы могут накапливаться в одном и том же состоянии в большом количестве. Для них  $\langle n \rangle$  тем больше, чем меньше энергия состояния  $E$ . Что же касается ферми-частиц, то максимальное их число в одном квантовом состоянии не может превышать единицу, что согласуется с запретом Паули.

Химический потенциал  $\mu$ , который имеет размерность энергии, в случае ферми-частиц называют *энергией Ферми* или *уровнем Ферми* и обозначают  $E_F$ . При этом распределение Ферми-Дирака принимает вид

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1}.$$

Т.к. для фермионов  $\mu > 0$ , то энергия Ферми  $E_F > 0$  также больше нуля. (Энергия Ферми  $E_F$  медленно меняется с изменением температуры  $T$ ).

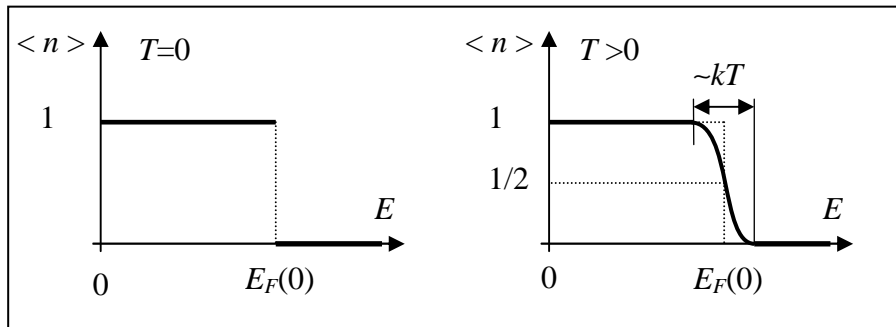
Рассмотрим зависимость распределения Ферми-Дирака от температуры. Будем считать, что рассматриваемая температура  $T$  может быть сколь угодно близка к абсолютному нулю, т.е.  $T \rightarrow 0$ . Обозначим через  $E_F(0)$  значение энергии Ферми при  $T \rightarrow 0$ . Этот случай будем условно на-

зывать случаем «нулевой температуры  $T=0$ ». Из распределения Ферми-Дирака следует, что в случае  $T=0$

$$\langle n \rangle = \begin{cases} 1, & E < E_F(0) \\ 0, & E > E_F(0) \end{cases}$$

Это означает, что все квантовые состояния с энергиями  $E < E_F(0)$  оказываются занятыми фермионами, а все состояния с энергиями  $E > E_F(0)$  - свободными. Таким образом, при  $T=0$  энергия Ферми  $E_F(0)$  является *максимальной энергией*, которой могут обладать ферми-частицы.

Распределение Ферми-Дирака в этом случае представляет собой ступенчатую функцию



единичной высоты, обрывающуюся при  $E = E_F(0)$ . При температурах, отличных от нуля резкий скачок  $\langle n \rangle$  от единицы до нуля становится более размытым и происходит в области энергий, шириной порядка нескольких  $kT$ . Чем выше температура, тем шире область, в которой  $\langle n \rangle$  меняется от единицы до нуля, и тем более плавно происходит переход от заполненных состояний к незаполненным. Однако, при *любой температуре* при  $E=E_F$   $\langle n \rangle = \frac{1}{2}$ . Т.е. в состоянии с энергией, равной энергии Ферми всегда находится один электрон.

Наряду с энергией Ферми  $E_F$  при анализе поведения ферми-частиц вводятся также импульс Ферми  $p_F$  и скорость Ферми  $v_F$ , определяемые соотношениями  $p_F = \sqrt{2m_e E_F}$ ,  $v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}}$

При  $T=0$  это максимальные импульс и скорость, которыми может обладать ферми-частица.

### Электронный газ в металлах

Применим статистику Ферми-Дирака к описанию электронов проводимости в металлах. Будем рассматривать свободные электроны, т.е. ту часть атомных электронов, которая может свободно перемещаться по всему проводнику. Именно эти электроны, в отличие от электронов, заполняющих внутренние электронные оболочки атомов, обеспечивают электропроводность металлов. Поэтому их называют *электронами проводимости*.

*Замечание.* Электроны проводимости в металлах не являются, вообще говоря, абсолютно свободными, т.к. испытывают взаимодействие с ионами, находящимися в узлах кристаллической решетки. Поэтому электроны находятся в усреднённом электрическом поле положительных ионов. Но внутри металла средняя суммарная сила, действующая на свободный электрон практически равна нулю, тогда как вблизи границе эта сила стремится вернуть электроны внутрь металла. Таким образом, можно рассматривать идеальный газ свободных электронов, находящихся внутри металла как в потенциальной яме.

Рассмотрим поведение электронного газа при  $T=0$ . В этом случае электроны располагаются на самых нижних доступных для них энергетических уровнях. Согласно запрету Паули в каждом состоянии может находиться не более одного электрона, но т.к. электроны могут различаться проекцией спина  $\pm \frac{1}{2}$ , то на каждом энергетическом уровне будет находиться по два электрона с различной ориентацией спинов. Два электрона заполняют самое низшее энергетическое состояние. Третий и четвертый электроны находятся на первом возбужденном энергетическом состоянии.

ческом уровне, следующая пара электронов - на втором возбужденном уровне и т.д. Если число электронов в металле равно  $N$ , то при  $T=0$  будут заполнены первые  $N/2$  уровней с энергией  $E \leq E_{max}$ . Все остальные уровни с энергией  $E > E_{max}$  будут свободны. Сравнивая полученный результат с распределением Ферми-Дирака при  $T=0$ , приходим к выводу, что максимальная энергия электронов  $E_{max}$  совпадает с энергией Ферми  $E_F(0)$ .

Хотя энергия электронов в металле квантуется и энергетический спектр электронов является дискретным, но уровни энергии расположены настолько плотно, что энергетический спектр электронов можно считать практически непрерывным (квазинепрерывным).

Найдем функцию распределения электронов проводимости по энергии. Плотность кван-

товых состояний для электронов в металле  $g(E) = \frac{\sqrt{2}m_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} V \sqrt{E}$ .

Произведение  $g(E)$  на ширину энергетического интервала  $dE$  определяет число состояний, приходящихся на интервал энергий от  $E$  до  $E+dE$ . Умножая это произведение на  $\langle n \rangle$ , т.е. на вероятность заполнения данного энергетического состояния, находим число электронов  $dN$ , энергия которых лежит в интервале от  $E$  до  $E+dE$ .

Интегрируя это выражение по энергии, получаем полное число свободных электронов в металле  $N = \int_0^\infty g(E) \langle n \rangle dE$ .

Запишем аналогичные выражения для концентрации электронов  $n = \frac{N}{V}$ . С учетом вида  $g(E)$

$$\text{получаем } dn = \frac{\sqrt{2}m_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE \text{ и } n = \int_0^\infty \frac{\sqrt{2}m_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE$$

$$\text{Функция } F(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{\sqrt{2}m_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \text{ называется функцией распределения свободных}$$

электронов по энергиям. При  $T=0$  функция  $F(E)$  имеет вид

$$F(E) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}m_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E}, & E < E_F(0) \\ 0, & E > E_F(0) \end{cases}$$

и распределение электронов по энергиям описывается выражением

$$dn = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}m_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE, & E < E_F(0) \\ 0, & E > E_F(0) \end{cases}$$

*Замечание.* Функции распределения играют в статистической физике очень важную роль. Так, например, если известна функция распределения частиц по энергиям  $F(E)$ , то можно найти среднее значение любой физической величины  $f$ , зависящей от  $E$ . Оно определяется соотношением

$$\langle f \rangle = \frac{\int_0^\infty f(E) F(E) dE}{\int_0^\infty F(E) dE} = \frac{1}{n} \int_0^\infty f(E) F(E) dE.$$



Получим выражение для энергии Ферми  $E_F(0)$  при  $T=0$ . Поскольку при абсолютном нуле температуры  $\langle n \rangle = 1$  при  $E < E_F(0)$  и  $\langle n \rangle = 0$  при  $E > E_F(0)$ , то верхний предел интеграла в

$$\text{можно заменить на } E_F(0): n = \int_0^{E_F(0)} \frac{\sqrt{2m_0^2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} \frac{\sqrt{2m_0^2}}{\pi^2 \hbar^3} (E_F(0))^{\frac{3}{2}}.$$

Тогда  $E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$ . Из этого соотношения можно по известному значению концентрации найти энергию Ферми  $E_F(0)$ , или, наоборот, по известной энергии Ферми найти концентрацию свободных электронов в металле.

*Пример.* Оценим величину энергии Ферми для свободных электронов в металле при  $T=0$ . Пусть  $n = 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3} = 5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ , тогда  $E_F(0) \approx 5 \text{ эВ}$ . Таким образом,  $E_F(0)$  по порядку величины составляет несколько электрон-вольт. ♣

Наряду с энергией Ферми вводится понятие *температуры Ферми*  $T_F$ :  $T_F = \frac{E_F(0)}{k}$ .

$$\text{Но } E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}, \text{ поэтому } T_F = \frac{\hbar^2}{2m_0 k} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}.$$

*Пример.* При значении  $E_F(0) = 5 \text{ эВ}$  температура Ферми имеет величину  $T_F = 60000 \text{ К}$ , что более чем в 200 раз превышает комнатную температуру. ♣

Рассмотрим случай  $T > 0$ , когда ступенька в распределении Ферми-Дирака, характерная для  $T=0$ , размывается и переход от заполненных электронами состояний к незаполненным происходит более плавным образом.

Все состояния, энергия которых меньше энергии Ферми на величину  $\sim kT$ , заняты электронами. Все состояния, энергия которых превосходит энергию Ферми на величину  $\sim kT$ , оказываются свободными. И только в области энергий шириной  $\sim kT$  вблизи энергии Ферми имеются состояния, частично заполненные электронами. Однако, хотя ширина этой области, как правило, невелика по сравнению с энергией Ферми, эта область играет очень важную роль. *Только электроны, заполняющие состояния в этой области, могут принимать участие в различных физических процессах, происходящих в металлах. Только их энергия может изменяться в ходе этих процессов.*

Получим выражение для энергии Ферми  $E_F$  при отличной от нуля температуре металла. В этом случае

$$n = \frac{\sqrt{2m_0^2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}.$$

Это выражение позволяет в принципе найти энергию Ферми  $E_F$  как функцию температуры  $T$  и концентрации электронов  $n$ . Однако, в общем случае интеграл точно не берется. Приближенное значение интеграла удастся получить при  $kT \ll E_F$ . В этом случае для энергии Ферми получаем

$$E_F \approx E_F(0) \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{E_F(0)} \right)^2 \right].$$

Так как условие  $kT \ll E_F(0)$  выполняется для всего диапазона температур, при котором металлы существуют в твердом виде, то это соотношение справедливо для всех реализуемых на практике случаев. Более того, во многих ситуациях эта поправка оказывается ничтожно малой, так что ей можно пренебречь и считать, что  $E_F \approx E_F(0)$ . Действительно, если взять  $E_F(0) = 5$

эВ, то при комнатной температуре, т.е. при  $kT = 0,025$  эВ, относительная величина поправки к  $E_F(0)$  составляет  $\frac{E_F - E_F(0)}{E_F(0)} = 2 \cdot 10^{-5}$ .

Однако, для понимания ряда физических явлений, таких, например, как поведение теплоемкости металлов при низких температурах или объяснение термоэдс, зависимость  $E_F$  от  $T$  имеет принципиальное значение.

*Замечание.* Из распределения свободных электронов в металле по энергиям можно также получить распределения электронов по импульсам  $p$  и по скоростям  $v$ . Эти распределения получаются с использованием соотношений  $p = \sqrt{2m_e E}$  и  $v = \sqrt{\frac{2E}{m_e}}$ .

Вырожденный электронный газ.

Вырожденный электронный газ - это газ, свойства которого существенно отличаются от свойств классического идеального газа из-за неразличимости одинаковых частиц в квантовой механике. Газ, состоящий из квантовых частиц, оказывается вырожденным тогда, когда среднее расстояние между частицами  $\langle a \rangle$  становится меньше или сравнимым с дебройлевской длиной волны частицы  $\lambda_B$ , т.е.  $\langle a \rangle \approx \lambda_B$ . Когда это условие нарушается в случае разреженных газов квантовые распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака переходят в классическое распределение Больцмана.

*Температурой вырождения* называется температура, ниже которой проявляются квантовые свойства газа, обусловленные тождественностью его частиц. Для газа, состоящего из бозе-частиц, *температура вырождения* определяется как температура, ниже которой происходит бозе-конденсация, т.е. переход заметной доли частиц в состояние с нулевой энергией. (Именно с бозе-конденсацией связаны такие интересные физические явления, как сверхтекучесть жидкого гелия, т.е. его способность протекать через тонкие щели и капилляры без какой-либо вязкости, и сверхпроводимость некоторых металлов и сплавов.)

Для газа, состоящего из ферми-частиц, температурой вырождения является температура Ферми  $T_F$ . Как следует из выражения  $T_F = \frac{\hbar^2}{2m_0 k} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}$ , температура вырождения тем больше, чем меньше масса частиц и чем больше их концентрация, поэтому  $T_F$  особенно велика у электронного газа в металлах:  $T_F \sim 10^4$  К.

При температуре  $T < T_F$ , т.е. при  $kT < E_F(0)$ , электронный газ в металлах является вырожденным. При температуре  $T > T_F$ , т.е. при  $kT > E_F(0)$ , электронный газ невырожден.

*Замечание.* Поскольку температура Ферми для металлов имеет величину  $T_F \sim 10^4$  К, то электронный газ в металлах оказывается вырожденным при всех температурах, при которых металл остается в *твердом состоянии*.

В полупроводниках характер поведения электронного газа зависит от величины концентрации носителей заряда. В примесных полупроводниках при высокой концентрации донорной примеси электронный газ может оказаться вырожденным. В полупроводниках с акцепторной примесью свойствами вырожденного газа может обладать газ дырок. Такие полупроводники называются вырожденными полупроводниками.

Для обычных газов, состоящих из атомов или молекул, являющихся ферми-частицами, температура вырождения близка к абсолютному нулю. Поэтому такие газы во всей области температур вплоть до температуры сжижения являются невырожденными и подчиняются классической статистике Максвелла-Больцмана.

*Пример.* Вычислим интервал между соседними энергетическими уровнями свободных электронов в металле при  $T=0$  вблизи уровня Ферми. Считайте, что концентрация свободных электронов  $n=10^{28}$  м<sup>-3</sup>.

*Решение:* Для решения задачи воспользуемся выражением  $\Delta n = \frac{\sqrt{2}m_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \Delta E$ , где  $\Delta E$  - разность энергий между ближайшими энергетическими уровнями, а  $\Delta n$  - изменение числа электронов при переходе на соседний уровень. Поскольку на каждом уровне при  $T=0$  находится два электрона, то  $\Delta n = 2$ . Подставляя в приведенное соотношение выражение для энергии Ферми получаем  $\Delta E = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m_e} \frac{1}{(3\pi^2n)^{1/3}} \approx 2 \cdot 10^{-22}$  эВ. Это настолько ничтожно малая величина, что обнаружить ее практически невозможно. Поэтому энергетический спектр свободных электронов в металле можно считать непрерывным (квазинепрерывным).

*Лекция 16. Эмиссия электронов из металла.*

*Работа выхода электрона из металла. Термоэлектронная эмиссия, формула Ричардсона — Дэймана. Эффект Шоттки. Холодная (автоэлектронная) эмиссия.*

## Электронная эмиссия

Электронная эмиссия - это явление испускания электронов поверхностью твердого тела или жидкости.

Термоэлектронная эмиссия (ТЭ) - электронная эмиссия, возникающая в результате нагрева.

Электростатическая или автоэлектронная эмиссия - эмиссия электронов, вызванная наличием у поверхности тела сильного электрического поля.

Фотоэлектронная эмиссия (ФЭ) или внешний фотоэффект — эмиссия электронов из вещества под действием падающего на его поверхность излучения.

Вторичная электронная эмиссия - испускание электронов поверхностью твердого тела при её бомбардировке электронами.

Ионно-электронная эмиссия - испускание электронов металлом при его бомбардировке ионами.

Криогенная электронная эмиссия - испускание электронов ультрахолодными, охлаждёнными до криогенных температур поверхностями.

## Работа выхода электронов из металла.

Свободные электроны относительно свободно перемещаются в пределах всего объема образца металла. Это вызвано тем, что внутри металла электрическое поле ионов кристаллической решётки является «почти» усреднённым, и поэтому суммарная сила, действующая на электроны в глубине металла, т.е. вдали от поверхности образца, «почти» равна нулю. Обозначим потенциал этого усредненного поля как  $\Phi_0$ . Тогда внутри металла энергия взаимодействия электрона с ионным полем равна  $W_{\text{ВНУТР}_\text{ЭЛ}} = -e \cdot \Phi_0$ . Однако, электроны внутри металла движутся. Поэтому полная энергия электрона внутри металла равна сумме кинетической и потенциальной

$$W_{\text{ВНУТР}} = W_{\text{ВНУТР}_\text{ЭЛ}} + W_{\text{ВНУТР}_\text{КИН}} = -e \cdot \Phi_0 + W_{\text{ВНУТР}_\text{КИН}}.$$

Работа, необходимая для выхода электрона из металла

$$A = W_{\text{КОНЕЧ}} - W_{\text{НАЧ}}$$

При удалении электрона от металла на большое расстояние энергия взаимодействия равна нулю  $W_\infty = 0$ , поэтому для минимальной работы получаем, что  $W_{\text{КОНЕЧ}} = 0$ . Т.к.  $W_{\text{НАЧ}} = W_{\text{ВНУТР}}$ . Т.к. работа выхода электрона из металла равна минимальной работе, то

$$A_{\text{MIN}} = e \cdot \Phi_0 - (W_{\text{ВНУТР}_\text{КИН}})_{\text{MAX}}.$$

При  $T=0$  максимальная кинетическая энергия электрона равна энергии Ферми

$$(W_{\text{ВНУТР}_\text{КИН}})_{\text{MAX}} = E_F$$

Поэтому при  $T=0$  работа выхода равна однозначно определённой величине

$$A_{\text{ВЫХ}_0} = e \cdot \Phi_0 - E_F.$$

При  $T>0$  в металле часть электронов приобретают энергию  $(W_{\text{ВНУТР}_\text{КИН}})_{\text{MAX}} > E_F$ , поэтому, вообще говоря, минимальная работа уже не определяется однозначно, т.к. она зависит от температуры, и с увеличением  $T$  уменьшается  $A_{\text{MIN}} < A_{\text{ВЫХ}}$ .

Величина работы выхода зависит также, например, от состояния поверхности металла. Если, в частности на поверхность металла нанести тонкий слой атомов или молекул другого вещества, то это повлияет на величину работы выхода.

## Термоэлектронная эмиссия

При повышении температуры часть электронов приобретает энергию  $(W_{\text{ВНУТР}_\text{КИН}})_{\text{MAX}} > E_F$ .

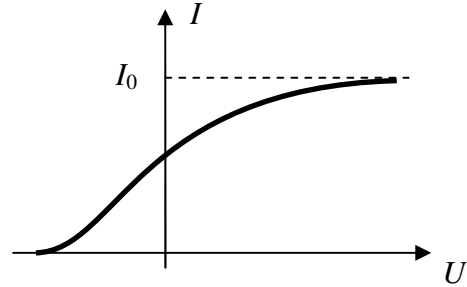
$$A_{MIN} = e \cdot \Phi_0 - E_F - \left[ (W_{ВНУТР\_КИН})_{MAX} - E_F \right] = A_{ВЫХ} - \left[ (W_{ВНУТР\_КИН})_{MAX} - E_F \right]$$

Для части электронов при повышении температуры может быть справедливо равенство

$$\left[ (W_{ВНУТР\_КИН})_{MAX} - E_F \right] > A_{ВЫХ}.$$

Поэтому эти электроны способны выйти из металла.

Если образец металла поместить во внешнее электрическое поле, то вышедшие электроны смогут создать электрический ток, который называется *термоэлектронным током*.



Вольтамперная характеристика

Термоэлектронную эмиссию можно наблюдать, например, в устройстве, которое называется *вакуумный диод*, основным элементом которой является катод, выполненный из проволоки из тугоплавкого металла и анод, выполненный в виде цилиндра, коаксиального с проволокой. Катод и анод находятся в колбе, из которой откачан воздух.

Вакуумный диод включается в электрическую цепь. При этом напряжение между катодом и анодом можно изменять. Если электроны, вылетающие с катода при его нагреве, достигают анода, то в цепи протекает электрический ток.

Плотность термоэлектронного тока насыщения определяется формулой Ричардсона-Дэшмана

$$j_s = A \cdot T^2 e^{-\frac{A_B}{kT}}$$

где  $A = 1,20 \cdot 10^6 \text{ А/(м}^2 \cdot \text{К}^2)$  – универсальная константа.

Как следует из этой формулы плотность тока насыщения сильно зависит как от температуры металла, так и от работы выхода. Поэтому при изготовлении электронных ламп проводят специальную обработку катода для снижения работы выхода.

#### Формула Ленгмюллера.

Найдём зависимость плотности тока насыщения от напряжения между катодом и анодом. Для этого рассмотрим распределение потенциала электрического поля между катодом и анодом, вызванное наличием эмиссионных электронов. Если предположить, что распределение зарядов в среднем «постоянное» во времени, то соответствующую задачу можно рассматривать как электростатическую. Поэтому следует рассмотреть уравнение Пуассона для потенциала

$$\Delta \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}.$$

Для простоты, предположим, что задача одномерная, т.е. все параметры зависят только от одной координаты « $x$ ». Тогда уравнение Пуассона примет вид

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}.$$

Если напряжение между катодом и анодом равно  $U$ , то граничные условия примут вид: потенциал на катоде равен нулю  $\Phi(x=0) = 0$ , а на аноде – величине напряжения  $\Phi(x=l) = U$ .

Плотность эмиссионного тока равна  $j = env$  ( $n$  – концентрация электронов,  $e$  – величина элементарного заряда,  $v$  – средняя скорость упорядоченного движения), объемная плотность заряда  $\rho = -en$  (заряд электронов – отрицательный), поэтому  $\rho = -\frac{j}{v}$ .

Изменение кинетической энергии электронов равно работе кулоновской силы  $\frac{mv^2}{2} = e\varphi$ ,

где  $\varphi - 0 = \varphi$  – разность потенциалов между катодом и данной точкой поля. Поэтому  $v = \sqrt{\frac{2e\varphi}{m}}$

В итоге, получаем уравнение для потенциала  $\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{j}{\sqrt{\frac{2e\varphi}{m}}}$ . Считая плотность тока постоянной величиной, ищем решение этого уравнения в виде  $\varphi = cx^w$ . Тогда первое граничное условие будет удовлетворено «автоматически».

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{j}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{m}{2e}} \frac{1}{\sqrt{\varphi}}, \quad cx^{w-2} w(w-1) = \frac{j}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{m}{2e}} \frac{1}{\sqrt{c}} x^{-\frac{w}{2}}, \quad \text{откуда } w = \frac{4}{3}.$$

Подставляя второе граничное условие, находим  $c = \frac{U}{l^{\frac{4}{3}}}$ . Тогда из  $\frac{U}{l^{\frac{4}{3}}} \frac{4}{3} \left( \frac{4}{3} - 1 \right) = \frac{j}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{m}{2e}} \frac{1}{\sqrt{\frac{U}{l^{\frac{4}{3}}}}}$  на-

ходим связь плотности тока и напряжения между катодом и анодом  $j = \frac{4}{9} \frac{\epsilon_0}{l^2} \sqrt{\frac{2e}{m}} \cdot U^{3/2}$ , т.е.

$$j = a \cdot U^{3/2}.$$

Это выражение носит название закон «трёх вторых» или закон Ленгмюллера (Чайльда-Ленгмюллера-Богуславского).

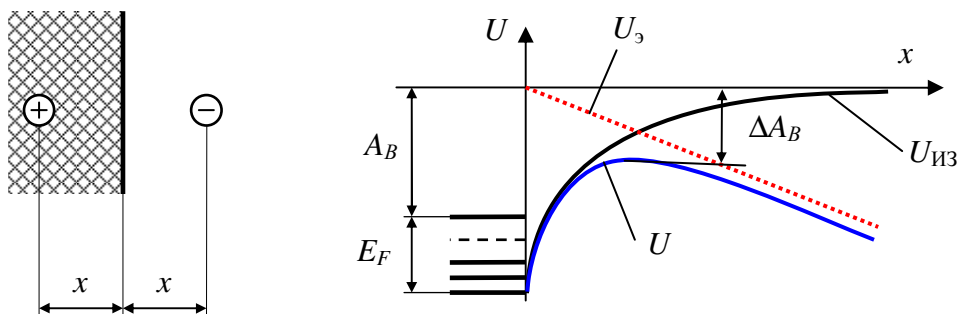
### Эффект Шоттки

При выходе электронов из металла, последний приобретает положительный заряд, что приводит к появлению электрических сил, препятствующих выходу электронов. При этом между катодом и анодом устанавливается устойчивое пространственное распределение отрицательного заряда, также препятствующего выходу электронов. Как говорят, на границе металла появляется потенциальный барьер, препятствующий эмиссии электронов. Величину этого барьера можно уменьшить, и тем самым усилить эмиссию электронов, если приложить внешнее электрическое поле. Это явление называется *эффектом Шоттки*.

Вальтер Шоттки (Walter Schottky) – немецкий физик. Внёс фундаментальный вклад в физические основы эмиссионной электроники (изобрёл триод, установил зависимость для эмиссионного тока – Шоттки эффект, предложил супергетеродинный принцип усиления) и физики полупроводников (предложил механизм проводимости, исследовал барьер металл – полупроводник и создал теорию полупроводникового диода – диода Шоттки).

Силу взаимодействия вышедшего электрона с металлом можно найти, используя метод

электрических изображений  $F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e \cdot e}{(2x)^2}$ , тогда энергия взаимодействия  $U_{из} = -\frac{1}{16\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{x}$ .



Пусть вблизи поверхности металла есть электрическое поле, вектор напряжённости которого  $\vec{E}_B$  направлен к поверхности металла. Тогда на вышедшие электроны будет действовать сила  $\vec{F} = -e\vec{E}_B$ , вектор которой направлен от металла. Энергия для этой силы имеет вид  $U_\gamma = -eE_B x$ . Тогда суммарная энергия электрона, вышедшего из металла равна

$$U = U_0 + U_{H3} + U_9 = U_0 - \frac{1}{16\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{x} - eE_B x.$$

где  $U_0 = E_F + A_B$  - энергия электрона внутри металла.

Найдем максимум этого выражения  $U = \left( U_0 - \frac{1}{16\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{x} - eE_B x \right)' = \frac{1}{16\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{x^2} - eE_B = 0,$

$$x = \sqrt{\frac{1}{16\pi\epsilon_0} \frac{e}{E_B}}, \quad U_{MAX} = U_0 - 2 \frac{e^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_B}}{\sqrt{16\pi\epsilon_0}}.$$

Поэтому работа выхода уменьшится на величину  $\Delta A_B = U_0 - U_{MAX} = 2 \frac{e^2 \sqrt{E_B}}{\sqrt{16\pi\epsilon_0}}$ .

Следовательно, плотность термоэмиссионного тока

$$j_s = A \cdot T^2 e^{\frac{A_B - \Delta A_B}{kT}} = A \cdot T^2 e^{\frac{\Delta A_B}{kT}} e^{\frac{A_B}{kT}} = A \cdot T^2 e^{\frac{2e^2 \sqrt{E_B}}{kT \sqrt{16\pi\epsilon_0}}} e^{\frac{A_B}{kT}}$$

увеличится.

Т.к. при отсутствии внешнего электрического поля плотность термоэмиссионного тока равна

$$j_s = A \cdot T^2 e^{-\frac{A_B}{kT}},$$

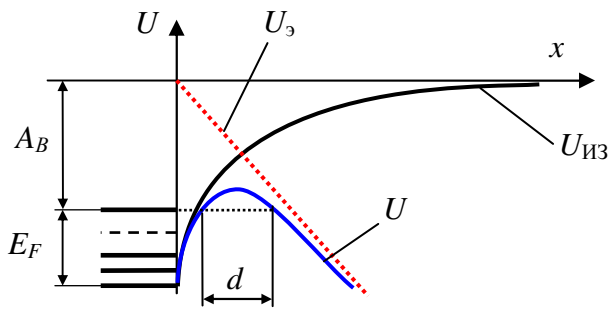
то изменение плотности тока при наличии внешнего электрического поля с величиной напряжённости  $E_B$  равно

$$j_{S_{E_r}} = j_S e^{\frac{e^2}{kT\sqrt{4\pi\epsilon_0}}\sqrt{E_B}} = j_S e^{0,44\frac{\sqrt{E_B}}{T}}.$$

Данная формула хорошо согласуется с экспериментальными данными лишь при небольших значениях напряжённости. При увеличении напряжённости внешнего электрического поля всё большую роль начинает играть холодная эмиссия..

Холодная (автоэлектронная) эмиссия.

Приложенное внешнее электрическое поле может привести к уменьшению ширины потенциального барьера вблизи поверхности металла, что приведёт выходу электрона из металла за счёт туннельного эффекта. Это явление называется холодной (автоэлектронной) эмиссией.



Если напряжённость внешнего поля достаточно высокая, то это приводит к сужению потенциального барьера для электронов с энергией, порядка энергии Ферми. Поэтому уже при низких температурах возможен туннельный выход электронов. Поэтому это явление и получило название холодная эмиссия.

Для оценки плотности тока можно пренебречь полем, возникающим из-за выхода электрона из металла, а рассматривать только

внешнее электрическое поле.

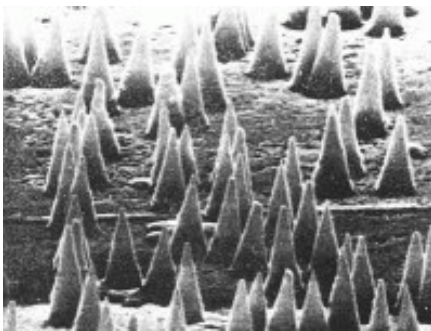
Коэффициент прозрачности барьера для частиц с энергией  $E$

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^d \sqrt{2m(U_0 - eE_B x - E)} dx\right) = \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e E_B} (U_0 - E)^{3/2}\right)$$

где ширина барьера  $d$  определяется равенством  $U_0 - eE_B d = E$ .

Т.к. коэффициент прозрачности  $D \sim \exp\left(-\frac{1}{E_B}\right)$ , то для плотности тока можно написать соотношение

$j = j_0 \exp\left(-\frac{\bar{E}_0}{E_B}\right)$ , где  $\bar{E}_0 \approx 10^8 \dots 10^9$  В/м. Поэтому значительная плотность тока холодной эмиссии достигается при таких же значениях напряжённости внешнего электрического поля.



С помощью автоэлектронной эмиссии принципиально возможно получение плотности тока  $10^6 \div 10^8$  А/см<sup>2</sup>, но для этого нужны эмиттеры со специальной поверхностью в виде совокупности большого числа острий, получение которой в промышленных масштабах является весьма трудоёмкой задачей. Кроме того, увеличение плотности тока до  $10^8$  А/см<sup>2</sup> приводит к взрывообразному разрушению острий и всего эмиттера.

Оказывается, что существует возможность получения плотности тока до  $10^9$  А/см<sup>2</sup> при так называемой *взрывной электронной эмиссии*, обусловленной взрывами микроострий на катоде. Ток взрывной электронной эмиссии необычен по структуре. Он состоит из отдельных порций электронов  $10^{11} \div 10^{12}$  штук, имеющих вид электронных лавин и получивших название *эктонов* (начальные буквы «*explosive centre*»). Время образования лавин  $10^{-9} \div 10^{-8}$  с.

Появление электронов в эктоне вызвано быстрым перегревом микроучастков катода и является, по существу, разновидностью термоэлектронной эмиссии. Существование эктона проявляется в образовании кратера на поверхности катода. Прекращение эмиссии электронов в эктоне обусловлено охлаждением зоны эмиссии за счет теплопроводности, уменьшения плотности тока, испарения атомов.

Взрывная эмиссия электронов и эктоны играют фундаментальную роль в вакуумных искрах и дугах, в разрядах низкого давления, в сжатых и высокопрочных газах, в микропромежутках, т.е. там, где в наличии есть электрическое поле высокой напряженности на поверхности катода.

Явление взрывной электронной эмиссии послужило основой для создания импульсных электрофизических установок, таких как сильноточные ускорители электронов, мощные импульсные и рентгеновские устройства, мощные релятивистские сверхвысокочастотные генераторы. Например, импульсные ускорители электронов имеют мощность  $10^{13}$  Вт и более при длительности импульсов  $10^{-10} \div 10^{-6}$  с, токе электронов  $10^6$  А и энергии электронов  $10^4 \div 10^7$  эВ. Такие



пучки широко используются для исследований в физике плазмы, радиационной физике и химии, для накачки газовых лазеров и пр.

*Заключение.* При небольших величинах напряжения между катодом и анодом плотность тока (насыщения) зависит от приложенного напряжения по закону «трех вторых». В этом случае между катодом и анодом устанавливается устойчивое во времени пространственное распределение отрицательного заряда, мешающее свободному выходу электронов из катода.

При увеличении напряжения (и напряженности) электронное облако смещается от катода, что позволяет электронам свободнее выходить из катода. Это соответствует эффекту Шоттки.

При ещё большем увеличении напряжённости электрического поля начинают проявляться квантово-механические явления, выражающиеся в туннелировании электронов из металла в окружающее пространство, что вызывает увеличение плотности тока насыщения.

Существует некоторое предельное значение плотности тока насыщения, при котором характер эмиссии электронов меняется на взрывной с образованием *эктонов* – сгустков или лавин электронов, и сопровождающийся плавлением материала катода.

*Лекции 17 - 18. Зонная теория твердых тел.*

*Электроны в периодическом поле кристалла. Модель Кронига - Пенни. Образование энергетических зон для электронов в кристалле. Зонная структура в металлах, полупроводниках и диэлектриках. Проводимость металлов. Сверхпроводимость.*

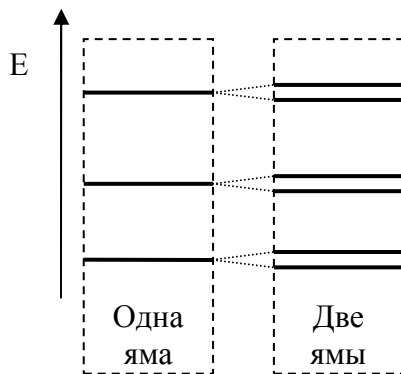
## Типы связей между атомами

**Ионная связь** между атомами разных химических элементов существует в том случае, когда атом одного элемента забирает валентные электроны у атома другого элемента. При этом электронные конфигурации образовавшихся ионов обладают устойчивостью. Например, одновалентный натрий отдаёт электрон со своей внешней оболочки семивалентному хлору. Ион натрия с положительным зарядом устойчивостью, т.к. для последующей его ионизации требуется значительная энергия. Образовавшийся отрицательный ион хлора на внешней оболочке имеет 8 электронов и эта оболочка полностью заполнена. Обе конфигурации обладают устойчивостью. Но два иона притягиваются электростатическими силами, образуя молекулу поваренной соли  $NaCl$ . Эта молекула, являясь электрическим диполем, взаимодействует с другими подобными молекулами, в результате чего образуется кристалл соли.

Возможен тип связи, при которой между молекулами возникают так называемые силы Ван-дер-Ваальса. Эти силы можно охарактеризовать как усреднение взаимодействия между полярными молекулами. Такой тип связи наблюдается, например, у кристаллических  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $CH_4$  и т.д.

**Ковалентная связь** образуется в случае, когда два атома постоянно обмениваются двумя валентными электронами с противоположно направленными спинами. В результате такого обмена каждый из электронов одновременно находится в каждом из атомов. Такой тип у атомов решётки алмаза, германия.

Возможно образование такой связи между атомами, при которой все атомы объединяют свои валентные электроны. Т.е. валентные электроны одновременно принадлежат всем атомам и поэтому свободно могут перемещаться от одного атома к другому. Такие электроны называют свободными, а такой тип связи – металлическим типом связи. Оказывается, что для атомов типичных металлов металлический тип связи между одинаковыми атомами энергетически более



выгоден (при обычных условиях) в случае, когда они располагаются в структуры с пространственной симметрией. Как говорят, атомы образуют кристаллическую решетку, обладающую определённой пространственной симметрией.

Рассмотрим движение частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме, в которой имеется потенциальный барьер конечной высоты  $U_0$ , разделяющий яму на две одинаковые части. Энергия частицы меньше высоты барьера  $E < U_0$ . Оказывается, что в этом случае каждый из уровней энергии частицы в одной яме расщепится на два близких подуровня.

Соответственно, если рассматривается задача о нахождении частицы в  $N$  ямах, то уровни энергии расщепляются на  $N$  подуровней.

ровней.

В кристалле такое расщепление вызвано влиянием соседних атомов. При этом количество подуровней равно количеству атомов. Действительно, в одинаковых атомах одинаковые электроны не могут находиться в одинаковых состояниях. Поэтому соответствующие одинаковые уровни энергии в системе взаимодействующих атомов «слегка» смещаются на небольшие значения, т.е. как бы расщепляются уровни энергии свободных атомов.

Потенциальная энергия взаимодействия электрона с атомом на большом расстоянии выражается как энергия в водородоподобном атоме  $U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$ . Если электрон находится бли-

же остальных электронов к ядру, то энергия принимает вид  $U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$  ( $Z$  – зарядовое число). Т.е. энергию взаимодействия электрона можно рассматривать как потенциальную яму.

Рассмотрим одномерную модель кристалла, в которой кристалл состоит из одинаковых атомов, расположенных вдоль одной прямой линии. Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния

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

При рассмотрении, что потенциальная энергия является периодической функцией с периодом  $a$ , т.е.  $U(x) = U(x + n \cdot a)$ , где  $n$  – целое число. Тогда плотность вероятности тоже должна быть периодической функцией  $|\psi(x)|^2 = |\psi(x + na)|^2$ .

Метод Блоха состоит в том, что пси-функцию записываем в виде  $\psi(x) = \varphi(x) \cdot e^{ikx}$ , где  $\varphi(x) = \varphi(x + n \cdot a)$  – периодическая функция. Т.е. волновая функция в соседних ячейках кристалла отличается фазовым множителем

$$\psi(x + na) = \varphi(x + na) \cdot e^{ik(x+na)} = \varphi(x) \cdot e^{ikx} \cdot e^{ikna} = \psi(x) \cdot e^{ikna}$$

Поэтому для поиска функции  $\varphi(x)$  достаточно рассмотреть одну ячейку кристалла.

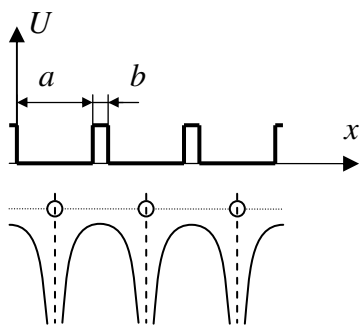
Т.к.  $\frac{d\psi}{dx} = \frac{d(\varphi \cdot e^{ikx})}{dx} = \frac{d\varphi}{dx} \cdot e^{ikx} + ik \cdot \varphi \cdot e^{ikx}$  и  $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d^2\varphi}{dx^2} \cdot e^{ikx} + 2ik \cdot \frac{d\varphi}{dx} \cdot e^{ikx} - k^2 \cdot \varphi \cdot e^{ikx}$ , то уравнение

Шрёдингера примет вид (после сокращения на множитель  $e^{ikx}$ )

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

Вводим обозначение  $E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$  и переписываем уравнение в виде

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



#### Одномерная модель Кронига-Пенни

В этой модели периодическое поле кристалла представляется в виде периодических прямоугольных барьеров высотой  $U_0 > E$

$$U = \begin{cases} U_0, & (n-1)(a+b) + a < x < n(a+b) \\ 0, & (n-1)(a+b) < x < (n-1)(a+b) + a \end{cases}$$

Поэтому в яме уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2\varphi_I}{dx^2} + 2ik \cdot \frac{d\varphi_I}{dx} - k^2\varphi_I + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi_I = 0$$

Вводим обозначение  $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ . Корни характеристического уравнения  $\lambda = -ik \pm i\alpha$ , поэтому

$$\varphi_I = C_1 e^{-i(\alpha+k)x} + C_2 e^{i(\alpha-k)x}.$$

Внутри барьера

$$\frac{d^2\varphi_{II}}{dx^2} + 2ik \cdot \frac{d\varphi_{II}}{dx} - k^2\varphi_{II} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\varphi_{II} = 0$$

Вводим обозначение  $\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)$ . Корни характеристического уравнения  $\lambda = -ik \pm \beta$ , поэтому  $\Phi_{II} = C_3 e^{-(\beta+ik)x} + C_4 e^{(\beta-ik)x}$

Условия на границах (с учётом периодичности)

$$\Psi_I(a) = \Psi_{II}(a), \quad \frac{d\Psi_I}{dx}(a) = \frac{d\Psi_{II}}{dx}(a), \quad \Psi_I(0) = \Psi_{II}(a+b), \quad \frac{d\Psi_I}{dx}(0) = \frac{d\Psi_{II}}{dx}(a+b)$$

$$C_1 e^{-i(\alpha+k)a} + C_2 e^{i(\alpha-k)a} = C_3 e^{-(\beta+ik)a} + C_4 e^{(\beta-ik)a}$$

$$-i(\alpha+k)C_1 e^{-i(\alpha+k)a} + i(\alpha-k)C_2 e^{i(\alpha-k)a} = -(\beta+ik)C_3 e^{-(\beta+ik)a} + (\beta-ik)C_4 e^{(\beta-ik)a}$$

$$C_1 + C_2 = C_3 e^{-(\beta+ik)(a+b)} + C_4 e^{(\beta-ik)(a+b)}$$

$$-i(\alpha+k)C_1 + i(\alpha-k)C_2 = -(\beta+ik)C_3 e^{-(\beta+ik)(a+b)} + (\beta-ik)C_4 e^{(\beta-ik)(a+b)}$$

Система четырёх однородных уравнений относительно четырёх неизвестных

$$e^{-i(\alpha+k)a}C_1 + e^{i(\alpha-k)a}C_2 - e^{-(\beta+ik)a}C_3 - e^{(\beta-ik)a}C_4 = 0$$

$$-i(\alpha+k)e^{-i(\alpha+k)a}C_1 + i(\alpha-k)e^{i(\alpha-k)a}C_2 + (\beta+ik)e^{-(\beta+ik)a}C_3 - (\beta-ik)e^{(\beta-ik)a}C_4 = 0$$

$$C_1 + C_2 - e^{-(\beta+ik)(a+b)}C_3 - e^{(\beta-ik)(a+b)}C_4 = 0$$

$$-i(\alpha+k)C_1 + i(\alpha-k)C_2 + (\beta+ik)e^{-(\beta+ik)(a+b)}C_3 - (\beta-ik)e^{(\beta-ik)(a+b)}C_4 = 0$$

Определитель этой системы должен быть равен нулю

$$\begin{vmatrix} e^{-i(\alpha+k)a} & e^{i(\alpha-k)a} & -e^{-(\beta+ik)a} & -e^{(\beta-ik)a} \\ -i(\alpha+k)e^{-i(\alpha+k)a} & i(\alpha-k)e^{i(\alpha-k)a} & (\beta+ik)e^{-(\beta+ik)a} & -(\beta-ik)e^{(\beta-ik)a} \\ 1 & 1 & -e^{-(\beta+ik)(a+b)} & -e^{(\beta-ik)(a+b)} \\ -i(\alpha+k) & i(\alpha-k) & (\beta+ik)e^{-(\beta+ik)(a+b)} & -(\beta-ik)e^{(\beta-ik)(a+b)} \end{vmatrix} = 0$$

Из полученного трансцендентного уравнения следует неоднозначная зависимость между энергией  $E$  и волновым числом  $k$ . Если точнее, то существуют интервалы значений энергии, для которых полученное уравнение имеет решения  $E(k)$ . Такие интервалы получили название *разрешённые зоны энергии*. Интервалы значений энергии, для которых нет решений у данной системы, называют *запрещёнными зонами энергии*.

Для свободного электрона зависимость между нерелятивистским импульсом и энергией можно записать в виде  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Если импульс свободной частицы записать через длину волны

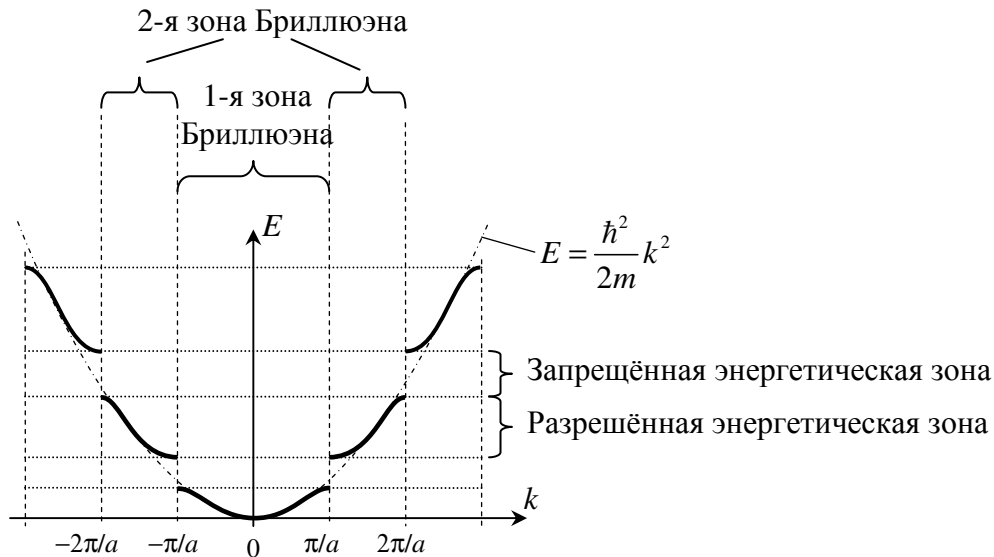
де Бройля  $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda}\hbar = k\hbar$ , где  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  - волновое число, то зависимость между энергией и

волновым числом будет иметь вид параболы  $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ .

В периодическом поле кристалла появляются ограничения на значения энергии в виде разрешённых и запрещённых зон. Поэтому зависимость между энергией и волновым числом будет существовать только на определённых интервалах волновых чисел. Эти интервалы называются *зонами Бриллюэна*.

1-я зона Бриллюэна соответствует интервалу  $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ , 2-я зона - объединению интервалов  $k \in \left(-\frac{2\pi}{a}; -\frac{\pi}{a}\right) \cup \left(\frac{\pi}{a}; \frac{2\pi}{a}\right)$  и т.д.

Внутри конечного кристалла размера  $L$  могут двигаться свободно только частицы в состояниях, для которых длина волны де Бройля целочисленно кратна размеру ячейки  $\lambda = l \cdot a$ ,



или, с учётом размера ячейки  $a = \frac{L}{N}$ , где  $N$  – число ячеек, получаем, что  $\lambda = l \cdot \frac{L}{N}$ . Откуда для

волнового числа следует равенство  $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{L} \frac{N}{l}$ . Т.к.  $l = 1, \dots, N$ , то в пределах одной разрешённой энергетической зоны существует  $N$  дискретных значений энергии. Поэтому расстояние между этими дискретными уровнями энергии в пределах одной зоны, обратно пропорционально числу ячеек в кристалле. Т.е. уровни энергии расположены настолько близко, что распределение энергии в пределах одной энергетической зоны можно считать квазинепрерывным.

При рассмотрении реальных трёхмерных кристаллов используют теорему Флюге-Блоха о виде пси-функции для решения уравнения Шрёдингера в трёхмерных кристаллах.

Пусть вектор  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  – такой вектор, что наборы целых чисел  $(n_1, n_2, n_3)$  определяют положения атомов в кристаллической решётке, тогда

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{i(\vec{k}, \vec{R})}$$

сдвиг аргумента волновой функции в направлении вектора  $\vec{R}$  аналогичен умножению функции на фазовый множитель  $e^{i(\vec{k}, \vec{R})}$ , где  $\vec{k}$  – некоторый вектор.

Поэтому решение уравнения Шрёдингера

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

в трёхмерных кристаллах следует искать в виде  $\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) \cdot e^{i(\vec{k}, \vec{r})}$ , где функция

$\varphi(\vec{r} + \vec{R}) = \varphi(\vec{r})$ , периодическая по кристаллу, называется функцией (или волной) Блоха.

При поиске решения возникают соотношения между разрешёнными зонами энергии  $E$  и координатами вектора  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ . Такие зависимости  $E(\vec{k})$  в трёхмерном пространстве также называют зонами Бриллюэна.

*Зоны Бриллюэна* – это области значений волнового вектора  $\vec{k}$ , в которых энергия электронов изменяется непрерывно, а на границах претерпевает разрыв.

Понятие зоны Бриллюэна играет важнейшую роль в физике твёрдого тела. Например, установлено, что на кристаллической решётке дифрагируют только те лучи, волновой вектор которых оканчивается на границе зоны Бриллюэна.

Из-за периодичности кристаллической решётки и наличия зон Бриллюэна в кристалле возникают запрещённые и разрешённые энергетические состояния. Возникновение запрещённых зон связано с тем, что для волн определённых длин де Бройля электрона на границе зон Бриллюэна возникает условие брэгговского отражения, и волна отражается от границы зоны. Физически это равносильно тому, что возникает стоячая волна, и, следовательно, групповая скорость данной электронной волны равна нулю. Таким образом, возникает интервал запрещённых частот (т.е. энергий).

### Проводимость металлов

Рассмотрим движение электрона, участвующего в электропроводимости, с точки зрения классической физики. На электрон со стороны внешнего электрического поля действует сила  $\vec{F}_K = q\vec{E}$ , а со стороны усреднённого поля решётки металла и других электронов действует сила сопротивления  $\vec{F}_C$ , поэтому уравнение движения имеет вид  $m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_K + \vec{F}_p = \vec{F}_{\text{ОБЩ}}$ . Электрический ток создаётся упорядоченным движением заряженных частиц, движущихся с установившейся скоростью (скоростью дрейфа).

Если рассматривать волновое описание движения электронов, то как описать электропроводность в этом случае? Оказывается, что классическое рассмотрение и в этом случае остаётся справедливым, только необходимо модифицировать некоторые классические понятия.

Введём понятие *эффективной массы* электрона, движущегося в периодическом поле кристалла. Уравнение движения оставим в прежнем виде  $m_{\text{эфф}} \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_{\text{ОБЩ}}$ . Предположим, что электрон движется вдоль силовой линии поля, поэтому вдоль линии тока можно перейти от векторов к скалярам  $m_{\text{эфф}} \frac{dv}{dt} = F_{\text{ОБЩ}}$ .

В качестве скорости электрона примем групповую скорость волнового пакета  $v = \frac{d\omega}{dk}$ .

Т.к.  $E = \hbar\omega$ , то  $v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ . Найдем ускорение  $\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left( \frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}$ . (Здесь использовано соотношение  $\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dk} \frac{dk}{dt}$ .)

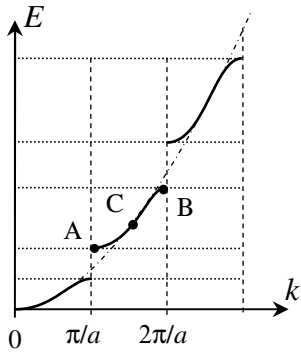
Мощность силы равна скорости изменения кинетической энергии  $F_{\text{ОБЩ}} v = \frac{dE}{dt}$ . Тогда

$F_{\text{ОБЩ}} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dt}$  или  $\frac{dk}{dt} = \frac{F_{\text{ОБЩ}}}{\hbar}$ . Подставим это выражение в формулу для ускорения  $\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F_{\text{ОБЩ}}$  или  $\frac{\hbar^2}{\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)} \frac{dv}{dt} = F_{\text{ОБЩ}}$ . Поэтому эффективная масса электрона принимает вид

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)}.$$

Для свободно движущегося электрона  $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ , поэтому  $\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$  и  $m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)} = m$ , т.е.

совпадает с обычной массой.



Если электрон движется в периодическом поле кристалла, то зависимость  $E(k)$  непрерывна в пределах зон Бриллюэна.

Рассмотрим, например, вторую зону. Точка А находится на нижней границе зоны, поэтому под действием внешней силы скорость электронов должна только увеличиваться (на границе зоне функция  $E(k)$  терпит разрыв). Т.е.  $\frac{dv}{dt} = \frac{F_{\text{ОБЩ}}}{m_{\text{эфф}}} > 0$ , откуда

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)} > 0, \text{ поэтому в этой точке } \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)_A > 0. \text{ Соответственно,}$$

точка В находится на верхней границе зоны, поэтому под действием внешней силы скорость электронов должна только уменьшаться. Т.е.  $\frac{dv}{dt} = \frac{F_{\text{ОБЩ}}}{m_{\text{эфф}}} < 0$ , откуда  $m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)} < 0$ , поэтому

в этой точке  $\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)_B < 0$ . Тогда существует точка перегиба графика - точка С, в которой

$$\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)_C = 0. \text{ В этой точке } m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)} = \infty, \text{ т.е. электрон не «реагирует» на внешнюю силу-}$$

ускорение равно нулю  $\frac{dv}{dt} = \frac{F_{\text{ОБЩ}}}{m_{\text{эфф}}} = 0$ . Соответствующую скорость можно принять за скорость дрейфа.

*Замечание.* В реальных кристаллах эффективная масса зависит от направления движения, т.е. является тензорной величиной.

#### Зонная структура в металлах, полупроводниках и диэлектриках

В кристаллических телах существуют разрешённые и запрещённые энергетические зоны, в каждой из которых имеется большое число дискретных подуровней энергии, количество которых равно числу атомов в кристалле.

Для того чтобы электрон принял участие в электропроводности, у него должна появиться соответствующая скорость упорядоченного движения. Т.о. под воздействием внешней силы электрон должен приобрести дополнительную энергию, т.е. перейти на следующий энергетический уровень. Это возможно только в том случае, если уровень энергии свободен (в соответствии с запретом Паули).

Если в пределах одной разрешённой энергетической зоны существуют свободные уровни энергии, то электроны могут перейти на эти уровни даже под воздействием небольшого внешнего воздействия.

Если в пределах данной зоны свободных уровней нет, но есть в следующей (по возрастанию), то электрону необходимо сообщить дополнительную энергию такой величины, чтобы он смог «перепрыгнуть» запрещённую энергетическую зону.

Распределение электронов по разрешённым энергетическим зонам и расположение этих зон на энергетической диаграмме определяет электропроводность тел.

Т.к. электроны стремятся занять состояние с наименьшей энергией, то существует зона полностью заполненная, но обладающая наибольшей энергией. Её принято называть *валентной зоной*. Следующая за ней зона, называемая *зоной проводимости*, может быть не заполненной или частично заполненной.

В различных веществах, а также в различных формах одного и того же вещества, энергетические зоны располагаются по-разному. По взаимному расположению этих зон вещества делят на три большие группы

*Проводники* - вещества, у которых либо электроны имеются в зоне проводимости, либо валентная зона и зона проводимости перекрываются. Таким образом, электрон может свободно перемещаться между уровнями энергии, получив любую допустимо малую энергию. К проводникам относят все металлы. Щелочные и благородные металлы имеют один валентный электрон, поэтому зона с наибольшей энергией у них будет заполнена наполовину. Такие металлы хорошо проводят электрический ток. Щелочноземельные элементы имеют два валентных электрона, и, казалось бы, их зоны должны быть полностью заполнены, однако зоны в этих металлах перекрываются с образованием «общей» зоны «большой вместимости». Из-за этого зона с наибольшей энергией не полностью заполнена, а сами щелочноземельные элементы оказываются проводниками.

*Диэлектрики* – вещества, энергетические зоны у которых не перекрываются и расстояние между ними составляет более 3,5 эВ. Таким образом, для того, чтобы перевести электрон из валентной зоны в зону проводимости требуется значительная энергия, поэтому диэлектрики ток практически не проводят. Четырехвалентный углерод (алмаз) имеет полностью заполненную валентную зону, отделенную от зоны проводимости запрещенной зоной порядка 5 эВ; алмаз оказывается хорошим изолятором. Ионные кристаллы, являющиеся диэлектриками, также состоят из атомов с полностью заполненными валентными зонами.

*Полупроводники* – это вещества, у которых зоны не перекрываются, но расстояние между ними составляет менее 10 кТ при комнатной температуре. Для того чтобы перевести электрон из валентной зоны в зону проводимости требуется энергия меньшая, чем для диэлектрика, поэтому чистые (собственные, нелегированные) полупроводники слабо пропускают ток. Часть электронов в результате теплового движения сможет «перебраться» из полностью заполненной зоны в зону проводимости. В таком случае в валентной зоне появятся свободные состояния (дырки), а в зоне проводимости - состояния, занятые электронами.

Четырехвалентные кремний и германий имеют полностью заполненную валентную зону, отделенную от зоны проводимости запрещенной зоной порядка 1,2 и 0,7 эВ соответственно, что составляет примерно 10кТ при комнатной температуре, электроны могут в таком случае переходить из валентной зоны в зону проводимости; кремний и германий являются самыми распространенными полупроводниками. Электропроводность германия при нагреве быстрее увеличивается, чем кремния, поскольку ширина запрещенной зоны германия меньше, чем кремния.

Поскольку одним из основных механизмов передачи электрону энергии является тепловой, то проводимость полупроводников очень сильно зависит от температуры. Также, проводимость можно увеличить, создав разрешенный энергетический уровень в запрещенной зоне, путем легирования. Подобным образом создаются все полупроводниковые приборы: солнечные элементы (преобразователи света в электричество), диоды, транзисторы, твердотельные лазеры и другие.

Зонная теория является основой современной теории твёрдых тел. Она позволила понять природу и объяснить важнейшие свойства металлов, полупроводников и диэлектриков. Величина запрещённой зоны между зонами валентности и проводимости является ключевой величиной в зонной теории, она определяет оптические и электрические свойства материала.

Переход электрона из валентной зоны в зону проводимости называют *процессом генерации носителей заряда* (отрицательного - электрона, и положительного - дырки), обратный переход - *процессом рекомбинации*.



*Сверхпроводимость.*

Сверхпроводимость - свойство некоторых материалов обладать строго нулевым электрическим сопротивлением при достижении ими температуры ниже определённого значения. Известны несколько десятков чистых элементов, сплавов и керамик, переходящих в сверхпроводящее состояние.

Явление сверхпроводимости открыл голландский физик Хейке Камерлинг-Оннес в 1911 году. Применяя полученный им ранее впервые в мире жидкий гелий, он изучал зависимость электрического сопротивления металлов от температуры. Он обнаружил, что при 4,15 К электрическое сопротивление ртути практически равно нулю.

Далее были обнаружены ещё вещества, переходящие в сверхпроводящее состояние при низких температурах: свинец, олово, таллий, уран. При этом было показано, что сверхпроводимость разрушается сильным магнитным полем.

Температурный интервал перехода в сверхпроводящее состояние для чистых образцов не превышает тысячных долей Кельвина и поэтому можно определить температуру перехода в сверхпроводящее состояние  $T_C$ . Эта величина называется критической температурой перехода. Ширина интервала перехода зависит от неоднородности металла, в первую очередь - от наличия примесей и внутренних напряжений. Известные ныне температуры  $T_C$  изменяются в пределах от 0,0005 К у магния (Mg) и низкотемпературных сверхпроводников ( $T_C$  ниже 77 К - температуры кипения жидкого азота), до примерно 135 К у ртутьсодержащих высокотемпературных сверхпроводников. В настоящее время наибольшее известное значение критической температуры - 135 К у ртутьсодержащих сверхпроводников, причем при внешнем давлении 350 тысяч атмосфер температура перехода возрастает до 164 К, что лишь на 19 К уступает минимальной температуре, зарегистрированной в природных условиях на поверхности Земли.

Достаточно сильное магнитное поле при данной температуре разрушает сверхпроводящее состояние вещества. Магнитное поле с напряжённостью  $H_C$ , которое при данной температуре вызывает переход вещества из сверхпроводящего состояния в нормальное, называется *критическим полем*. При уменьшении температуры сверхпроводника величина  $H_C$  возрастает. Зависимость величины критического поля от температуры с хорошей точностью описывается выражением

$$H_C = H_{C0} \left( 1 - \frac{T^2}{T_C^2} \right),$$

где  $H_{C0}$  - критическое поле при нулевой температуре.

Сверхпроводимость также исчезает и при пропускании через сверхпроводник электрического тока с плотностью, большей, чем критическая  $j_C$ , поскольку он создаёт магнитное поле, большее критического.

Нулевое сопротивление - не единственная особенность сверхпроводимости. Одним из главных отличий сверхпроводников от идеальных проводников является эффект Мейснера, открытый Вальтером Мейснером и Робертом Оксенфельдом в 1933 году.

Эффект Мейснера заключается в выталкивании сверхпроводником магнитного потока. Это вызвано существованием незатухающих токов внутри сверхпроводника, которые создают внутреннее магнитное поле, противоположно направленное внешнему, приложенному магнитному полю и компенсирующее его.

При охлаждении сверхпроводника, находящегося во внешнем постоянном магнитном поле, в момент перехода в сверхпроводящее состояние магнитное поле полностью вытесняется из его объёма. Этим сверхпроводник отличается от идеального проводника, у которого при падении сопротивления до нуля индукция магнитного поля в объёме должна сохраняться без изменения.

Отсутствие магнитного поля в объёме проводника позволяет заключить из общих законов магнитного поля, что в нём существует только поверхностный ток. Он физически реален и поэтому занимает некоторый тонкий слой вблизи поверхности. Магнитное поле тока уничтожает внутри сверхпроводника внешнее магнитное поле. В этом отношении сверхпроводник ведёт

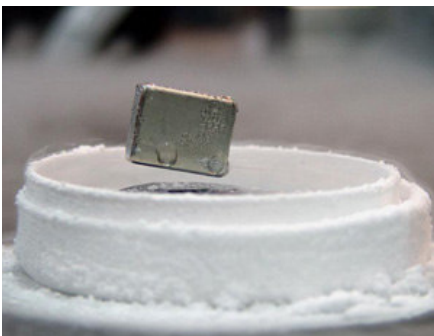
себя формально как идеальный диамагнетик. Однако он не является диамагнетиком, т.к. внутри него намагниченность равна нулю.

Впервые эффект Мейснера объяснили братья Фриц и Хайнц Лондон. Они показали, что в сверхпроводник магнитное поле проникает на фиксированную глубину от поверхности - лондоновскую глубину проникновения магнитного поля  $\lambda$ . Для металлов  $\lambda \sim 10^{-2}$  мкм.

Чистые вещества, у которых наблюдается явление сверхпроводимости, немногочисленны. Чаще сверхпроводимость бывает у сплавов. У чистых веществ имеет место полный эффект Мейснера, а у сплавов не происходит полного выталкивания магнитного поля из объёма (частичный эффект Мейснера). Вещества, проявляющие полный эффект Мейснера, называются сверхпроводниками *первого рода*, а частичный - сверхпроводниками *второго рода*.

У сверхпроводников второго рода в объёме имеются круговые токи, создающие магнитное поле, которое, однако, заполняет не весь объём, а распределено в нём в виде отдельных нитей. Что же касается сопротивления, оно равно нулю, как и в сверхпроводниках первого рода.

Переход вещества в сверхпроводящее состояние сопровождается изменением его тепловых свойств. Однако, это изменение зависит от рода рассматриваемых сверхпроводников. Так, для сверхпроводников I рода в отсутствие магнитного поля при температуре перехода  $T_C$  теплота перехода (поглощения или выделения) обращается в нуль, а следовательно терпит скачок теплоёмкость, что характерно для фазового перехода II рода. Когда же переход из сверхпроводящего состояния в нормальное осуществляется изменением приложенного магнитного поля, то тепло должно поглощаться (например, если образец теплоизолирован, то его температура понижается). А это соответствует фазовому переходу I рода. Для сверхпроводников II рода переход из сверхпроводящего в нормальное состояние при любых условиях будет фазовым переходом II рода.



Явление выталкивания магнитное поля можно наблюдать в эксперименте, который получил название «гроб Магомета». Если магнит положить на поверхность плоского сверхпроводника, то можно наблюдать левитацию – магнит будет висеть на некотором расстоянии от поверхности, не касаясь её. Даже в полях с индукцией порядка 0,001 Тл заметно смещение магнита вверх на расстояние порядка сантиметра. Это объясняется тем, что магнитное поле выталкивается из сверхпроводника, поэтому магнит, приближающийся к сверхпроводнику, «увидит» магнит одинаковой полярности и точно такого же размера, - что и вызовет левитацию.

Название этого эксперимента - «гроб Магомета» - связано с тем, что по преданию, гроб с телом пророка Магомета висел в пространстве без всякой поддержки.

Первое теоретическое объяснение сверхпроводимости было дано в 1935 году Фрицем и Хайнцем Лондоном. Более общая теория была построена в 1950 году Л.Д. Ландау и В.Л. Гинзбургом. Она получила широкое распространение и известна как теория Гинзбурга - Ландау. Однако эти теории имели феноменологический характер и не раскрывали детальные механизмы сверхпроводимости. Впервые сверхпроводимость на микроскопическом уровне получила объяснение в 1957 году в работе американских физиков Джона Бардина, Леона Купера и Джона Шриффера. Центральным элементом их теории, получившей название теории БКШ, являются так называемые куперовские пары электронов.

#### Квантово-механическая теория

Квантово-механическая теория сверхпроводимости (теория БКШ) рассматривает это явление как сверхтекучесть бозе-эйнштейновского конденсата куперовских пар электронов в металле с присущим сверхтекучести отсутствием трения. Электроны проводимости движутся в сверхпроводнике беспрепятственно - без «трения» о неоднородности кристаллической решетки.

Основная особенность сверхпроводников заключается в том, что в них возникает взаимное притяжение электронов с образованием электронных пар (так называемые куперовские пары). Причиной этого притяжения является дополнительное к кулоновскому отталкиванию взаимодействие между электронами, осуществляемое под воздействием кристаллической решётки и приводящее к притяжению электронов.

В квантовой теории металлов притяжение между электронами (обмен фононами) связывается с возникновением элементарных возбуждений кристаллической решётки. Электрон, движущийся в кристалле и взаимодействующий с другим электроном посредством решётки, переводит её в возбуждённое состояние. При переходе решётки в основное состояние излучается квант энергии звуковой частоты - фонон, который поглощается другим электроном. Притяжение между электронами можно представить как обмен электронами фононами, причём притяжение наиболее эффективно, если импульсы взаимодействующих электронов противоположно направлены.

Возникновение сверхпроводящего состояния вещества связано с возможностью образования в металле связанных пар электронов (куперовских пар). Оценка показывает, что электроны, образующие пару, находятся друг от друга на расстояниях порядка ста периодов кристаллической решётки. Вся электронная система сверхпроводника представляет собой сплочённое образование, простирающееся на громадные по атомным масштабам расстояния.

Если при сколь угодно низких температурах кулоновское отталкивание между электронами преобладает над притяжением, образующим пары, то вещество (металл или сплав) сохраняет обычные свойства. Если же при температуре  $T_C$  силы притяжения преобладают над силами отталкивания, то вещество переходит в сверхпроводящее состояние.

Важнейшей особенностью связанного в пары коллектива электронов в сверхпроводнике является невозможность обмена энергией между электронами и решёткой малыми порциями, меньшими, чем определенная величина энергии. Это означает, что при движении электронов в кристаллической решётке не изменяется энергия электронов и вещество ведёт себя как сверхпроводник с нулевым удельным сопротивлением. Квантово-механическое рассмотрение показывает, что при этом не происходит рассеяния электронных волн на тепловых колебаниях решётки или примесях. А это и означает отсутствие электрического сопротивления.

Для того чтобы разрушить состояние сверхпроводимости, необходима затрата определенной энергии. При температуре  $T = T_C$  происходит нарушение связанных состояний электронных пар, прекращается притяжение между электронами и состояние сверхпроводимости исчезает.

Следствием существования куперовских пар является квантование магнитного потока: минимальная величина магнитного потока, проходящего через поверхность, ограниченную замкнутым сверхпроводящим контуром, может принимать только дискретные значения (квантуется). Квант магнитного потока — минимальное значение магнитного потока  $\Phi$  через кольцо сверхпроводника с током, обусловленным движением куперовских пар электронов

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} \approx 2,0678 \cdot 10^{-15} \text{ Вб.}$$

### Эффект Джозефсона

Эффект Джозефсона - явление протекания сверхпроводящего тока через тонкий слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника. Такой ток называют джозефсоновским током, а такое соединение сверхпроводников - джозефсоновским контактом.

Различают стационарный и нестационарный эффекты Джозефсона.

Стационарный эффект - при пропускании через контакт тока, величина которого не превышает критическую, падение напряжения на контакте отсутствует (несмотря на наличие слоя диэлектрика). Эффект этот вызван тем, что электроны проводимости проходят через диэлектрик без сопротивления за счёт туннельного эффекта.

Нестационарный эффект - при пропускании через контакт тока, величина которого превышает критическую, на контакте возникает падение напряжения  $U$ , и контакт при этом начи-

нает излучать электромагнитные волны. При этом частота такого излучения определяется как  $\omega = \frac{2eU}{\hbar}$ , где  $e$  - заряд электрона.

Возникновение излучения связано с тем, что объединённые в куперовские пары электроны, создающие сверхпроводящий ток, при переходе через контакт приобретают избыточную по отношению к основному состоянию сверхпроводника энергию  $2eU$ . Единственная возможность для пары электронов вернуться в основное состояние — это излучить квант электромагнитной энергии  $\hbar\omega = 2eU$ .

Используя нестационарный эффект Джозефсона, можно измерять напряжение с очень высокой точностью.

Эффект Джозефсона используется в сверхпроводящих интерферометрах, содержащих два параллельных контакта Джозефсона. При этом сверхпроводящие токи, проходящие через контакт, могут интерферировать. Оказывается, что критический ток для такого соединения чрезвычайно сильно зависит от внешнего магнитного поля, что позволяет использовать устройство для очень точного измерения магнитных полей (МЭМС Гироскопы).

Если в переходе Джозефсона поддерживать постоянное напряжение, то в нём возникнут высокочастотные колебания. Этот эффект называется джозефсоновской генерацией. Возможен, конечно, и обратный процесс - джозефсоновское поглощение. Таким образом, джозефсоновский контакт можно использовать как генератор электромагнитных волн или как приёмник (эти генераторы и приёмники могут работать в диапазонах частот, не достижимых другими методами).

#### Высокотемпературные сверхпроводники

В 1986 году Карл Мюллер и Георг Беднорц открыли новый тип сверхпроводников, получивших название *высокотемпературных*. В 1987 году было показано, что соединения лантана, стронция, меди и кислорода (La-Sr-Cu-O) испытывают скачок проводимости практически до нуля при температуре 36 К.

В 1987 году был впервые получен сверхпроводник при температуре, превышающей температуру кипения жидкого азота (77,4 К): было обнаружено, что таким свойством обладает соединение иттрия, бария, меди и кислорода (Y-Ba-Cu-O). Сейчас «рекорд» принадлежит керамическому соединению Hg-Ba-Ca-Cu-O(F), критическая температура для которого равна 138 К. Более того, при давлении 400 кбар то же соединение является сверхпроводником при температурах до 166 К.

Высокотемпературные сверхпроводники - семейство материалов (сверхпроводящих керамик) с общей структурной особенностью, относительно хорошо разделёнными медно-кислородными плоскостями. Их также называют *сверхпроводниками на основе купратов*. Температура сверхпроводящего перехода, которая может быть достигнута в некоторых составах в этом семействе, является самой высокой среди всех известных сверхпроводников. Нормальное (и сверхпроводящие) состояния показывают много общих особенностей между различными составами купратов; многие из этих свойств не могут быть объяснены в рамках теории БКШ. Последовательной теории сверхпроводимости в купратах в настоящее время не существует; однако, проблема привела ко многим экспериментальным и теоретическим результатам, и интерес в этой области - не только в достижении сверхпроводимости при комнатной температуре. За экспериментальное открытие первого высокотемпературного сверхпроводника в 1987 была присуждена Нобелевская премия.

## Лекции 19 - 20. Собственная и примесная проводимость полупроводников.

*Уровень Ферми в чистых и примесных полупроводниках. Температурная зависимость проводимости полупроводников. Фотопроводимость полупроводников. Процессы генерации и рекомбинации носителей заряда. Эффект Холла в полупроводниках.*

## Общая характеристика проводимости полупроводников.

Полупроводниковые материалы имеют твердую кристаллическую структуру и по своему удельному сопротивлению ( $\rho = 10^{-6} \dots 10^8 \text{ Ом}\cdot\text{м}$ ) занимают промежуточную область между проводниками электрического тока ( $\rho = 10^{-8} \dots 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{м}$ ) и диэлектриками ( $\rho = 10^8 \dots 10^{14} \text{ Ом}\cdot\text{м}$ ).

При изготовлении полупроводниковых приборов и интегральных микросхем наиболее широко используются германий, кремний и арсенид галлия. К полупроводникам относятся также селен, теллур, некоторые окислы, карбиды и сульфиды.

Абсолютное большинство полупроводниковых устройств электроники используются в диапазоне температур от  $-60^\circ\text{C}$  до  $100^\circ\text{C}$ . Этот диапазон принято называть рабочими температурами. В качестве характерной температуры принимают середину этого диапазона, так называемую «комнатную температуру»  $T=290\div 300 \text{ К}$ .

Характерным свойством полупроводников является сильное изменение удельного сопротивления под влиянием электрического поля, облучения светом или ионизированными частицами, а также при внесении в полупроводник примеси или его нагреве. Если при нагреве удельное сопротивление проводников увеличивается, то полупроводников и диэлектриков – уменьшается. Это свидетельствует о различном характере проводимости названных материалов.

С точки зрения зонной теории проводники, полупроводники и диэлектрики различаются по расположению валентной зоны, зоны проводимости и запрещенной зоны между ними.

В частности, отличие полупроводников от диэлектриков – в ширине запрещенной зоны между валентной зоной и зоной проводимости. Для диэлектриков ширина запрещенной зоны по величине порядка нескольких эВ, для полупроводников  $\Delta E \sim kT$  (соизмеримо с тепловой энергией при комнатной температуре) и не больше 2 эВ.

*Пример.* У типичного полупроводника – кремния ширина запрещенной зоны при комнатной температуре составляет 1,12 эВ, а при  $T = 0 \text{ К}$  составляет 1,21 эВ, для германия ширина запрещенной зоны при комнатной температуре составляет 0,67 эВ.

У полупроводников часть электронов из валентной зоны способна при комнатной температуре преодолеть запрещенную энергетическую зону, т.е. перейти в зону проводимости.

## «Дырки».

При рассмотрении электропроводности полупроводников важным является понятие «дырки».

Вблизи абсолютного нуля температуры все уровни энергии в валентной зоне заполнены электронами. При повышении температуры часть электронов может перейти на нижний уровень зоны проводимости, что приведёт к появлению свободных уровней энергии в валентной зоне.

Переход электрона в зону проводимости означает, что электрон «оторвался» от конкретного атома и начал движение в пределах всего кристалла. В пространственной области вблизи атома, откуда «вылетел» электрон, до отрыва электрона суммарный импульс всех электронов был равен нулю, а также был равен нулю суммарный электрический заряд. Улетевший электрон унес импульс  $\vec{p}$  и заряд  $-e$ , поэтому оставшиеся электроны в этой пространственной области будут иметь суммарный импульс  $\vec{p}_{\text{обл}} = -\vec{p}$ , а суммарный заряд будет положительным  $+e$ . Т.е. вблизи атома как бы появится положительно заряженная «частица», обладающая определённым импульсом. Эту «частицу» и принято называть *дыркой* или *вакансией*.

Дырки в кристалле имеют определенную эффективную массу, энергию, импульс, набор квантовых чисел, т.д. Например, эффективная масса дырки должна быть равна эффективной массе недостающего электрона, но с обратным знаком. Однако, для электронов вблизи верхнего края валентной зоны (зоны Бриллюэна) эффективная масса электрона отрицательная, поэтому

масса дырки положительная. Энергию дырок следует отсчитывать от потолка валентной зоны вниз. Эффективная масса дырки зависит от уровня энергии в валентной зоне, на котором находится дырка.

*Пример.*

	Электроны		Дырки	
	Продольная масса	Поперечная масса	Легкие	Тяжелые
Германий	$1,58 m_e$	$0,082 m_e$	$0,04 m_e$	$0,3 m_e$
Кремний	$0,97 m_e$	$0,190 m_e$	$0,16 m_e$	$0,5 m_e$

Под действием тепловой энергии электроны в зоне проводимости так же, как и дырки в валентной зоне, совершают хаотическое тепловое движение. При этом возможен процесс захвата электронов зоны проводимости дырками валентной зоны. Такой процесс исчезновения пар электрон-дырка называется *рекомбинацией*. Число рекомбинаций пропорционально концентрации носителей заряда.

При рекомбинации электрона и дырки избыток энергии может выделяться в виде излучения или передаваться на возбуждение колебаний кристаллической решетки, а также может быть передано свободным носителям тока при тройных столкновениях.

Рекомбинация может происходить как при непосредственном столкновении электронов и дырок, так и через примесные центры, когда электрон сначала захватывается из зоны проводимости на примесный уровень в запрещенной зоне, а затем уже переходит в валентную зону.

В случае упорядоченного движения электронов дырки будут перемещаться в противоположном направлении, т.е. тоже будут двигаться упорядоченно. Таким образом, дырки участвуют в электропроводимости.

#### Уровень Ферми в полупроводниках.

В собственных (беспримесных) полупроводниках концентрация электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне равны, поэтому можно приближенно считать, что уровень Ферми не зависит от температуры и всегда лежит посередине запрещенной зоны.

#### Электропроводность полупроводников.

Электропроводность полупроводников можно рассматривать с позиций классической механики, то есть считать, что одновременно измеримы координаты и импульс как электронов, так и дырок, и что можно отслеживать движение каждого электрона и дырки индивидуально.

При комнатной температуре ( $T=300$  К) тепловая энергия  $kT \approx 0,026$  эВ, поэтому при ширине запрещенной зоны  $0,1 \div 1,5$  эВ можно считать, что для электронов в зоне проводимости выполняется сильное неравенство  $E - E_F \gg kT$ , вследствие которого распределение Ферми-

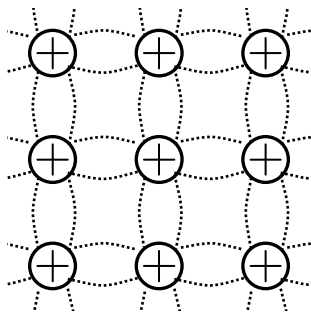
Дирака  $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$  для вероятности нахождения электрона в зоне проводимости (и дырки в

валентной зоне) превращается в распределение Больцмана  $\langle n \rangle \approx e^{-\frac{E-E_F}{kT}}$ .

Это позволяет при описании поведения электронов и дырок использовать классические подходы.

#### Беспримесные полупроводники.

Рассмотрим полупроводник кремний, имеющий кристаллическую структуру типа алмаза, в которой каждый атом соединен четырьмя ковалентными связями с ближайшими соседями. При температуре  $T=0$  К все связи заполнены электронами, что соответствует полностью заполненной валентной зоне и пустой зоне проводимости, отделенной от валентной зоны по энергии на 1,1 эВ. При увеличении температуры до примерно 200-300 К некоторые электроны из ва-



лентной зоны смогут перейти в зону проводимости; это соответствует «уходу» электрона из ковалентной связи и превращению его в «свободно перемещающийся» по кристаллу электрон.

На месте опустевшей ковалентной связи образуется дырка – «разорвавшаяся» ковалентная связь, которую покинул электрон. Электрон из соседней связи может «перескочить» в «дырку», тогда дырка как бы переместится на новое место. Поскольку электроны и дырки образуются парами, то, очевидно, что число дырок в рассмотренном случае равно числу электронов.

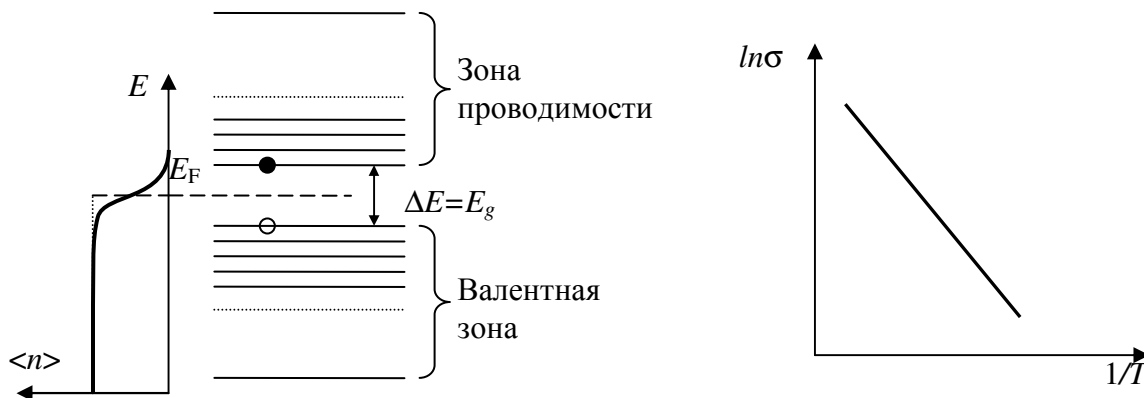
Один из свободных электронов может занять одну из дырок; в результате они оба исчезнут или рекомбинируют.

Вероятность рекомбинации пропорциональна произведению концентраций электронов и дырок. Вероятность зарождения пары электрон - дырка зависит от температуры полупроводника (а также от частоты и интенсивности излучения, падающего на полупроводник). В состоянии равновесия устанавливается равенство чисел скорости зарождения и рекомбинации электронов и дырок и связанные с ними концентрации последних, зависящие от температуры полупроводника, а также от частоты и интенсивности падающих на полупроводник излучений.

Найдём зависимость проводимости полупроводника от температуры.

Пусть энергия верхнего края валентной зоны равна  $E_0$ , тогда

$$\langle n \rangle \approx e^{\frac{E - E_F}{kT}} = e^{\frac{E - E_0 - (E_F - E_0)}{kT}}.$$



Если ширина запрещённой зоны равна  $\Delta E = E_g$ , то энергия электронов, находящихся на дне зоны проводимости, будет больше энергии электронов у потолка валентной зоны на величину  $\Delta E = E_g$ . Тогда, в соответствии с распределением Больцмана концентрация электронов вблизи нижнего края зоны проводимости задаётся выражением

$$n = n_0 e^{\frac{\Delta E - (E_F - E_0)}{kT}}$$

где  $n_0$  – концентрация электронов на уровне «потолка» валентной зоны. Т.к. уровень Ферми приходится на середину запрещённой зоны, то  $E_F - E_0 = \frac{\Delta E}{2} = \frac{E_g}{2}$ , поэтому

$$n = n_0 e^{\frac{-\Delta E}{2kT}}.$$

Поскольку удельная проводимость пропорциональна концентрации свободных носителей заряда, то

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$$

где коэффициент  $\sigma_0$  слабо зависит от температуры и его можно считать постоянным.

Таким образом, по экспериментальной зависимости  $\ln \sigma = f\left(\frac{1}{T}\right)$  можно найти ширину запрещённой зоны беспримесного полупроводника.

#### Подвижность носителя электрического тока.

Ток в полупроводнике формируется свободными электронами и дырками. Тогда плотность тока в полупроводнике, помещенном в электрическое поле напряжённости  $\vec{E}$

$$\vec{j} = -e \cdot n_n \vec{v}_n + e \cdot n_p \vec{v}_p$$

где индексы « $n$ » соответствуют электронам, а « $p$ » - дыркам.  $\vec{v}$  - скорость упорядоченного движения, а  $n$  - концентрация. Вводя подвижность носителей тока  $\mu_p = \frac{v_p}{E}$ ,  $\mu_n = \frac{v_n}{E}$  и учитывая, что электроны движутся против поля  $\vec{v}_n = -\mu_n \vec{E}$ , получаем закон Ома в дифференциальной форме для полупроводников  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ , где удельная проводимость  $\sigma = e \cdot (n_n \mu_n + n_p \mu_p)$ .

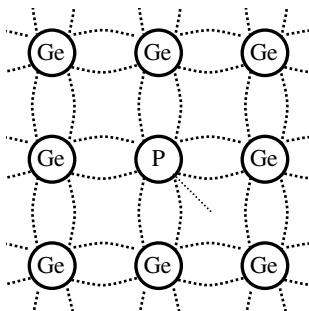
*Замечание.* Обычно подвижность электронов значительно выше, чем подвижность дырок, поскольку перемещение дырки - более сложный процесс, связанный с перескоками многих электронов. Например, у кремния при комнатной температуре подвижность электронов: 1200-1450 см<sup>2</sup>/(В·с), подвижность дырок - 500 см<sup>2</sup>/(В·с).

#### Примесная проводимость полупроводников.

Некоторые примеси даже при малых их концентрациях очень сильно изменяют проводимость полупроводника. Такие примеси приводят к появлению избыточного количества или свободных электронов, или дырок. Их называют соответственно донорными примесями (отдающими электроны) или акцепторными примесями (забирающими электроны).

Получившийся после добавления донорных примесей полупроводник называют донорным полупроводником. Его также называют электронным (так как в нем - избыток свободных электронов) или же полупроводником  $n$ -типа: от слова «*negative*» - отрицательный, поскольку в нем - избыток отрицательных свободных носителей заряда.

Получившийся после добавления акцепторных примесей полупроводник называют акцепторным полупроводником. Его также называют дырочным (так как в нем - избыток свободных дырок) или же полупроводником  $p$ -типа: от слова «*positive*» - положительный, поскольку в нем - избыток положительных свободных носителей заряда. Донорные полупроводники - пол-



лучаются при добавлении в полупроводник элементов, от которых легко «отрывается» электрон. Например, если к четырехвалентному кремнию (или германию) добавить пятивалентный мышьяк (или фосфор), то последний использует свои 4 валентных электрона для создания 4 валентных связей в кристаллической решетке, а пятый электрон окажется «лишним», такой электрон легко отрывается от атома и начинает относительно свободно перемещаться по кристаллу. В таком случае в кристалле образуется избыток свободных электронов. При этом в основном веществе полупроводника также может образоваться пара электрон – дырка (как для беспримесного полупроводника), однако для этого требуется значительно большая энергия, и поэтому вероятность такого процесса при комнатных температурах достаточно мала. Электроны в *донорном* полупроводнике принято называть *основными носителями заряда*, а дырки - *неосновными носителями заряда*.

Электроны в *донорном* полупроводнике принято называть *основными носителями заряда*, а дырки - *неосновными носителями заряда*.



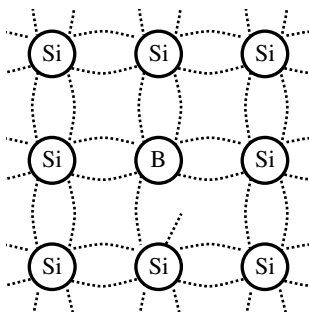
С точки зрения зонной теории наличие «легко отрывающихся» электронов соответствует появлению в запрещенной зоне донорных уровней энергии вблизи нижнего края зоны проводимости. Электрону для перехода в зону проводимости с такого уровня требуется меньше энергии, чем для перехода из валентной зоны, чему соответствует уход электрона из обычной ковалентной связи. При температурах порядка комнатной основной вклад в проводимость полупроводника будут давать электроны, перешедшие в зону проводимости с донорных уровней, вероятность же перехода электронов из валентной зоны



будет очень мала.

При увеличении температуры значительная часть электронов с малого числа донорных уровней перейдет в зону проводимости, кроме того, вероятность перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости увеличится. Поскольку число уровней в валентной зоне много больше, чем число примесных уровней, то с ростом температуры различие увеличивающихся концентраций электронов и дырок станет менее заметно; они будут отличаться на малую величину - концентрацию донорных уровней. Донорный характер полупроводника при этом будет все менее и менее выражен. И, наконец, при еще большем повышении температуры концентрация носителей заряда в полупроводнике станет очень большой, и донорный полупроводник станет аналогичен беспримесному полупроводнику, а затем - проводнику, зона проводимости которого содержит много электронов.

Уровень Ферми в донорном полупроводнике смещается вверх по шкале энергии, причем это смещение больше при низких температурах, когда концентрация свободных электронов значительно превышает число дырок. При повышении температуры, когда донорный характер полупроводника становится все менее и менее выраженным, уровень Ферми смещается в среднюю часть запрещенной зоны, как в беспримесном полупроводнике.



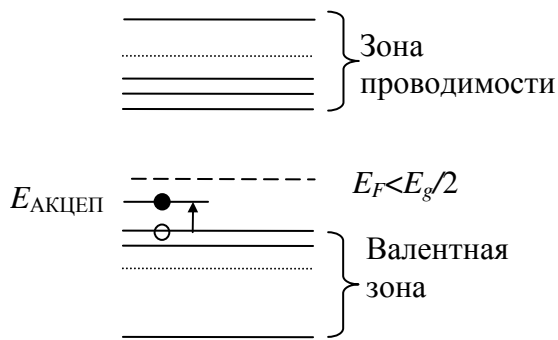
Акцепторные полупроводники - получают при добавлении в полупроводник элементов, которые легко «отбирают» электрон у атомов полупроводника. Например, если к четырехвалентному кремнию (или германию) добавить трехвалентный бор (индий), то последний использует свои три валентных электрона для создания трех валентных связей в кристаллической решетке, а четвертая связь окажется без электрона. Электрон из соседней связи может перейти на это пустое место, и тогда в кристалле получится дырка. В таком случае в кристалле образуется избыток дырок. Также может происходить образование пар электрон - дырка, как это рассматривалось в случае беспримесного

полупроводника, однако вероятность этого процесса при комнатных температурах достаточно мала. Дырки в *акцепторном* полупроводнике принято называть *основными носителями*, а электроны - *неосновными*.

На языке зонной теории переход электрона из полноценной ковалентной связи в связь с недостающим электроном соответствует появлению в запрещенной зоне акцепторных уровней вблизи нижнего края зоны проводимости. Электрону для такого перехода из валентной зоны на акцепторный уровень (при этом электрон просто переходит из одной ковалентной связи в почти такую же другую связь) требуется меньше энергии, чем для перехода из валентной зоны в зону проводимости, то есть для «полного ухода» электрона из ковалентной связи.

При температурах порядка комнатной основной вклад в проводимость полупроводника будут давать дырки, образовавшиеся в валентной зоне после перехода валентных электронов на

акцепторные уровни, вероятность же перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости будет очень мала.



При увеличении температуры значительная часть малого числа акцепторных уровней окажется занятой электронами. Кроме того, вероятность перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости станет значительной. Поскольку число уровней в валентной зоне много больше, чем число примесных уровней, то с ростом температуры различие увеличивающихся концентраций электронов и дырок станет менее заметно, так как они отличаются на малую величину - концентрацию акцепторных уровней. Ак-

цепторный характер полупроводника при этом будет все менее и менее выражен. И, наконец, при еще большем повышении температуры концентрация носителей заряда в полупроводнике станет очень большой, и акцепторный полупроводник станет аналогичен сначала беспримесному полупроводнику, а затем - проводнику.

Уровень Ферми в акцепторном полупроводнике смещается вниз по шкале энергии, причем это смещение больше при низких температурах, когда концентрация дырок значительно превышает концентрацию свободных электронов. При повышении температуры, когда акцепторный характер полупроводника становится все менее и менее выраженным, уровень Ферми смещается в среднюю часть запрещенной зоны, как в беспримесном полупроводнике.

Итак, при постепенном увеличении температуры наблюдается постепенное превращение как донорного, так и акцепторного полупроводника в полупроводник аналогичный беспримесному, а затем - в полупроводник аналогичный по проводимости проводнику. В этом заключается причина отказа при перегреве полупроводниковых устройств, состоящих из нескольких областей полупроводников донорного и акцепторного типов. При увеличении температуры различия между областями постепенно пропадают и в итоге полупроводниковое устройство превращается в простой проводник.

#### Фотопроводимость полупроводников.

Если на полупроводник падает поток квантов электромагнитных излучений с энергией  $\hbar\omega$  большей ширины запрещенной зоны  $E_g$ , то возможен внутренний фотоэффект в полупроводнике - переход электронов, поглотивших квант излучения, из валентной зоны в зону проводимости. Из-за этого количество электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне и связанная с ними проводимость полупроводника возрастают. Явление увеличения проводимости полупроводника под влиянием падающих излучений получило название фотопроводимости полупроводников.

Это явление очень важно для физики, так как позволяет определить две важных характеристики полупроводника - ширину запрещенной зоны и среднее время жизни носителей в полупроводнике.

Ширину запрещенной зоны вычисляют по найденной экспериментально красной границе внутреннего фотоэффекта - максимальной длине волны излучения  $\lambda_K$ , при которой возможен внутренний фотоэффект. Для этого используют соотношение:  $E_g = \hbar\omega_K$ .

Среднее время жизни носителей в полупроводнике вычисляют по найденной экспериментально зависимости проводимости полупроводника при облучении его светом. Рассмотрим беспримесный полупроводник при комнатной температуре. При отсутствии освещения в нем будет равновесная концентрация носителей заряда  $n_T$ ; с ней связана проводимость  $\sigma_T$ .

При освещении полупроводника будут рождаться пары электрон - дырка. Этот процесс скоро уравнивается рекомбинацией электронов и дырок, вероятность которой растет при увеличении концентраций последних. Через некоторое время скорость рекомбинации сравняет-

ся со скоростью зарождения электронов и дырок. При этом в полупроводнике установится новое значение концентрации электронов и дырок:  $n = n_T + n_I$ . Если теперь свет мгновенно выключить, то концентрации электронов и дырок постепенно из-за рекомбинации вернутся к значению  $n_T$ , которое наблюдалось до освещения полупроводника. Аналогичным образом будет изменяться проводимость полупроводника. Время  $\tau$ , за которое добавка к проводимости  $\sigma_I$  уменьшится приблизительно в  $e$  раз, называют *средним временем жизни* электронов и дырок в полупроводнике.

Явление фотопроводимости полупроводников очень важно для техники, так как позволяет конструировать полупроводниковые датчики, как света, так и других видов электромагнитных излучений.

В настоящее время полупроводниковые датчики используются как для измерения освещенности, так и для пересчета импульсов светового потока, например в устройствах регистрации числа оборотов и скорости вращения валов машин, перемещения узлов станков, чтения информации, записанной на компакт-дисках и т.д.

Полупроводниковые датчики используются и для измерения интенсивности ионизирующих излучений. В них происходят процессы, аналогичные рассмотренным выше; отличие в том, что электрон, выбитый из зоны проводимости, обладает очень большой энергией, которой достаточно для проведения ионизации многих других атомов полупроводника, что приводит к увеличению концентрации электронов и дырок и, как следствие, к увеличению проводимости полупроводника.

Следует заметить, что увеличение температуры, освещенности и радиационного облучения полупроводника приводят к увеличению его проводимости. Поэтому при использовании полупроводниковых датчиков для измерения одной из трех перечисленных величин стремятся уменьшить или хотя бы стабилизировать влияние двух других. Например, полупроводниковые датчики - измерители температуры тщательно защищают от света и радиации. Чувствительные полупроводниковые датчики светового и инфракрасного излучения охлаждают до температуры порядка 200 К, а иногда и ниже, чтобы уменьшить влияние проводимости, обусловленной тепловым возбуждением электронов и тем самым увеличить чувствительность к слабым потокам излучения. Если такой датчик не охлаждать, то малое число носителей заряда, образовавшееся в нем из-за воздействия излучения, будет незаметным на фоне большого числа носителей заряда, образовавшихся при тепловом движении.

#### Вырожденный полупроводник.

*Вырожденный полупроводник* - это полупроводник, концентрация примесей в котором настолько велика, что собственные свойства практически не проявляются, а проявляются в основном свойства примеси. При введении примесей, уровень химического потенциала начинает смещаться к одной из зон. При очень высокой концентрации примесей, он может оказаться очень близко и даже внутри одной из зон. У вырожденного полупроводника уровень Ферми лежит внутри разрешенных зон или внутри запрещенной зоны на расстояниях не более  $kT$  от границ разрешенных зон. В таком случае проявляется фермионный характер электронов проводимости или дырок. Для описания распределения носителей заряда в зонах нужно применять статистику Ферми-Дирака. Полупроводник начинает вести себя аналогично металлу.

Вырожденные полупроводники получают путём сильного легирования собственных полупроводников.

#### Экситон.

Дырка, являясь положительно заряженной частицей, может образовывать пары с электроном проводимости – своеобразный аналог водородоподобного атома, который получил название *экситон*.

Экситон (лат. *excito* - «возбуждаю») - водородоподобная квазичастица, представляющая собой электронное возбуждение в диэлектрике или полупроводнике, мигрирующее по кристал-

лу и не связанное с переносом электрического заряда и массы. Поэтому экситон не участвует в электропроводности полупроводников.

Хотя экситон состоит из электрона и дырки, его следует считать самостоятельной элементарной (не сводимой) частицей в случаях, когда энергия взаимодействия электрона и дырки имеет тот же порядок, что и энергия их движения, а энергия взаимодействия между двумя экситонами мала по сравнению с энергией каждого из них. Экситон можно считать элементарной квазичастицей в тех явлениях, в которых он выступает как целое образование, не подвергающееся воздействиям, способным его разрушить.

Если радиус экситона не превосходит периода кристаллической решётки, то он носит название *экситон Френкеля*.

Если радиус экситона значительно больше периода решётки, то его принято называть *экситон Ванье - Мотта*.

В полупроводниках из-за высокой диэлектрической проницаемости, существуют только экситоны Ванье-Мотта. Высокая диэлектрическая проницаемость приводит к ослаблению электростатического притяжения между электроном и дыркой, что и приводит к большому радиусу экситона. Экситоны Френкеля применимы, прежде всего, к молекулярным кристаллам.

При больших концентрациях носителей заряда в полупроводнике существенным становится экранирование кулоновского взаимодействия и может происходить разрушение экситонов Ванье-Мотта.

Экситоны Ванье-Мотта отчетливо проявляются в спектрах поглощения полупроводников а также в спектрах люминесценции, в фотопроводимости, в эффекте Штарка и эффекте Зеемана.

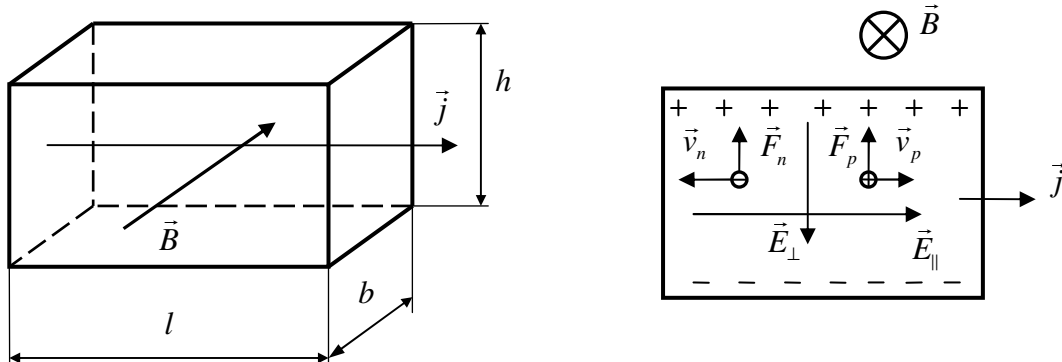
#### Эффект Холла в полупроводниках.

Рассмотрим образец полупроводника в виде прямоугольного параллелепипеда длиной  $l$ , высотой  $h$  и шириной  $b$ . Пусть вдоль стороны  $l$  течет ток плотности  $\vec{j}$ , а вдоль стороны  $b$  направлен вектор магнитной индукции  $\vec{B}$ . Эффект Холла состоит в появлении разности потенциалов, называемой *холловской*, между парой граней вдоль стороны  $h$ .

С плотностью тока  $\vec{j}$  связана дрейфовая скорость движения  $\vec{v}_p$  дырок и скорость электронов  $\vec{v}_n$

$$\vec{j} = -e \cdot n_n \vec{v}_n + e \cdot n_p \vec{v}_p.$$

Величина плотности тока прямо пропорциональна продольной напряжённости электрического поля  $\vec{j} = \sigma \vec{E}_{||}$ . Т.к. электроны движутся против вектора продольной напряжённости  $\vec{E}_{||}$ , а дырки в том же направлении, то на оба типа носителей действуют магнитные силы Лоренца,



направленные одинаково. В результате, дырки и электроны движутся в одинаковом поперечном направлении. Найдем плотность поперечного тока

$$\vec{j}_{\perp} = -e \cdot n_n \vec{v}_{n\perp} + e \cdot n_p \vec{v}_{p\perp}$$

Если  $\vec{E}_\perp$  - напряжённость поперечного электрического поля, то поперечные скорости электронов и дырок  $\vec{v}_{n\perp} = -\mu_n \left( \vec{E}_\perp + \frac{\vec{F}_n}{-e} \right)$ ,  $\vec{v}_{p\perp} = \mu_p \left( \vec{E}_\perp + \frac{\vec{F}_p}{e} \right)$ .

Т.к. магнитные силы Лоренца равны соответственно

$$\vec{F}_n = -e(\vec{v}_{n\parallel} \times \vec{B}) = -e(-\mu_n \vec{E}_\parallel \times \vec{B}) = e\mu_n (\vec{E}_\parallel \times \vec{B}),$$

$$\vec{F}_p = e(\vec{v}_{p\parallel} \times \vec{B}) = e(\mu_p \vec{E}_\parallel \times \vec{B}) = e\mu_p (\vec{E}_\parallel \times \vec{B}),$$

то

$$\begin{aligned} \vec{j}_\perp &= e \cdot n_n \mu_n \left( \vec{E}_\perp + \frac{\vec{F}_n}{-e} \right) + e \cdot n_p \mu_p \left( \vec{E}_\perp + \frac{\vec{F}_p}{e} \right), \\ \vec{j}_\perp &= e \cdot n_n \mu_n \left( \vec{E}_\perp + \frac{e\mu_n (\vec{E}_\parallel \times \vec{B})}{-e} \right) + e \cdot n_p \mu_p \left( \vec{E}_\perp + \frac{e\mu_p (\vec{E}_\parallel \times \vec{B})}{e} \right), \\ \vec{j}_\perp &= e \cdot n_n \mu_n \left( \vec{E}_\perp - \mu_n (\vec{E}_\parallel \times \vec{B}) \right) + e \cdot n_p \mu_p \left( \vec{E}_\perp + \mu_p (\vec{E}_\parallel \times \vec{B}) \right), \\ \vec{j}_\perp &= e \cdot \left( (n_n \mu_n + n_p \mu_p) \vec{E}_\perp + (n_p \mu_p \mu_p - n_n \mu_n \mu_n) (\vec{E}_\parallel \times \vec{B}) \right). \end{aligned}$$

При равновесном перераспределении зарядов поперечный ток отсутствует  $\vec{j}_\perp = \vec{0}$ , поэтому

$$\vec{E}_\perp = - \frac{(n_p \mu_p^2 - n_n \mu_n^2)}{(n_n \mu_n + n_p \mu_p)} (\vec{E}_\parallel \times \vec{B})$$

$$\text{Величина напряженности } E_\perp = \left| \frac{n_p \mu_p^2 - n_n \mu_n^2}{n_n \mu_n + n_p \mu_p} \right| E_\parallel B = \left| \frac{n_p \mu_p^2 - n_n \mu_n^2}{n_n \mu_n + n_p \mu_p} \right| \frac{j}{\sigma} B = \frac{|n_p \mu_p^2 - n_n \mu_n^2|}{e(n_n \mu_n + n_p \mu_p)^2} jB$$

Напряжение Холла между гранями

$$U_H = E_\perp h = \frac{|n_p \mu_p^2 - n_n \mu_n^2|}{e(n_n \mu_n + n_p \mu_p)^2} jBh.$$

Это выражение принято писать в виде

$$U_H = R_H jBh,$$

подразумевая, что постоянная Холла

$$R_H = \frac{n_p \mu_p^2 - n_n \mu_n^2}{e(n_n \mu_n + n_p \mu_p)^2}$$

может быть и отрицательной и положительной.

Например, для проводника  $p$ -типа можно считать, что  $n_p \gg n_n$ , поэтому  $R_H = \frac{1}{en_p} > 0$ , а

для проводника  $n$ -типа  $n_n \gg n_p$ , поэтому  $R_H = -\frac{1}{en_n} < 0$ .

Применение эффекта Холла.

Эффект Холла, в некоторых случаях, позволяет определить тип носителей заряда (электронный или дырочный) в металле или полупроводнике, что делает его незаменимым методом исследования свойств полупроводников.

На основе эффекта Холла работают датчики Холла - приборы, измеряющие напряжённость магнитного поля.

Датчики Холла получили очень большое распространение в бесколлекторных, или вентильных, электродвигателях (сервомоторах). Датчики закрепляются непосредственно на статоре двигателя и выступают в роли ДПР (датчика положения ротора). ДПР реализует обратную связь по положению ротора, выполняет ту же функцию, что и коллектор в коллекторном двигателе постоянного тока.

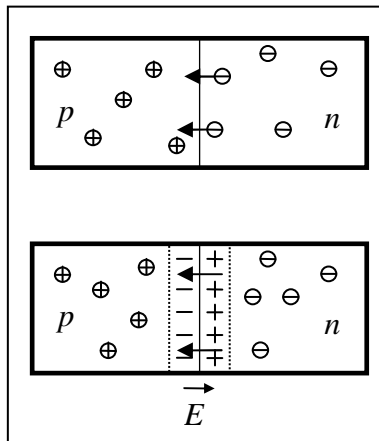
Также на основе эффекта Холла работают некоторые виды *ионных* реактивных двигателей.

## Лекции 21 - 22. Контактные явления в полупроводниках.

*p-n -переход. Распределение электронов и дырок в p-n-переходе. Ток основных и неосновных носителей через p-n -переход. Вольтамперная характеристика p-n -перехода. Выпрямляющие свойства p-n -перехода.*

## Полупроводниковый p-n- переход.

Полупроводниковым p-n- переходом называют тонкий слой, образующийся в месте контакта двух областей полупроводников акцепторного и донорного типов. Обе области полупроводника электрически нейтральны, поскольку как сам материал полупроводника, так и примеси электрически нейтральны. Отличия этих областей в том, что p-область содержит свободно перемещающиеся дырки, а n-область свободно перемещающиеся электроны.

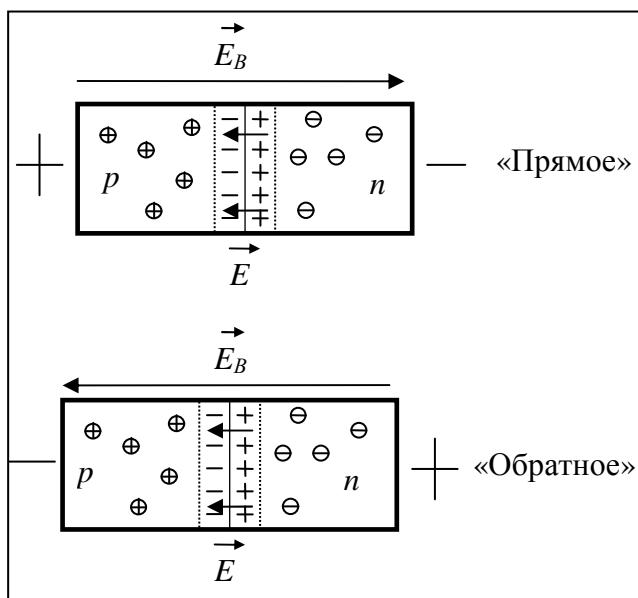


Концентрации свободных электронов и дырок по обе стороны от границы контакта разные, что приводит к появлению диффузии электронов из n-области в p-область, а дырок, наоборот, из p-области в n-область. Электроны, проникая в p-область рекомбинируют с дырками, а дырки в n-области рекомбинируют с электронами. Каждый из типов носителей переносит соответствующий электрический заряд, что приводит к тому, что вблизи границы раздела p-область получает избыточный отрицательный заряд, а n-область – положительный. Таким образом, на границе раздела полупроводников появляется двойной электрический слой, в котором вектор напряженности  $\vec{E}$  направлен от n-области к p-области. Поэтому появившееся электрическое поле препятствует движению электронов и дырок.

С этим электрическим полем можно связать потенциальную энергию дырки и электрона в соответствующих областях. Получается, что дырка для перехода из p-области в n-область должна «забраться» на потенциальный порог высоты  $W$ . На аналогичный порог должен «забраться» электрон для перехода из n-области в p-область. Вероятность такого прохода пропорциональна множителю Больцмана:

$$P = P_0 e^{-\frac{W}{kT}}.$$

Следовательно, рассмотренные переходы основных носителей сформируют силу тока основных носителей через p-n-переход:



$$I_{OCH} = I_0 e^{-\frac{W}{kT}}.$$

Неосновные носители – электроны в p-области и дырки в n-области свободно преодолевают контактное поле. В состоянии равновесия ток основных носителей будет компенсироваться током неосновных носителей. Поэтому

$$I_{HEOCH} = I_{OCH} = I_0 e^{-\frac{W}{kT}}.$$

Если к p-n-переходу приложить внешнюю разность потенциалов  $U$  так, что со стороны p – области будет больший потенциал, (так называемое «прямое» включение p-n-перехода), то внешнее поле  $\vec{E}_B$  ослабит существующее внутреннее поле  $\vec{E}$ , поэтому ток основных носителей возрастет в соответствии с формулой:

$$I_{OCH} = I_0 e^{-\frac{(W-eU)}{kT}}.$$

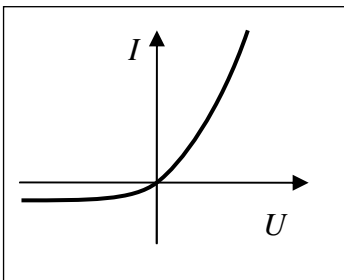
При включении  $p$ - $n$ -перехода в прямом направлении дырки в  $p$ -области будут двигаться к границе раздела, и электроны из  $n$ -области также будут двигаться к границе раздела. На границе они будут рекомбинировать. Ток на всех участках цепи обеспечивается основными носителями, сам  $p$ - $n$ -переход обогащен носителями тока. Проводимость  $p$ - $n$ -перехода будет большой. Ток неосновных носителей при этом практически не изменится, так как он определяется малым числом неосновных носителей в каждой области. Тогда суммарный ток через  $p$ - $n$ -переход равен сумме тока основных и неосновных носителей, направленных противоположно друг другу

$$I = I_{OCH} - I_{HEOCH} = I_0 e^{\frac{(W-eU)}{kT}} - I_0 e^{\frac{W}{kT}} = I_0 e^{\frac{W}{kT}} \left( e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right)$$

или

$$I = I_{HEOCH} \left( e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right).$$

Если к  $p$ - $n$ -переходу приложить внешнюю разность потенциалов «наоборот» (так называемое «обратное» включение  $p$ - $n$ -перехода), то внешнее поле  $\vec{E}_B$

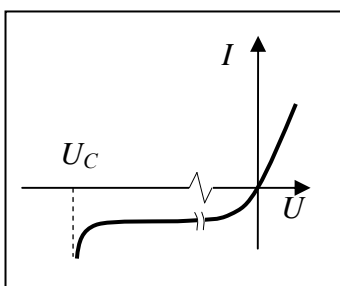


увеличит существующее на границе поле. Ток основных носителей от этого уменьшится. Ток неосновных носителей при этом практически не изменится, так как он лимитируется малым числом неосновных носителей. При включении  $p$ - $n$ -перехода в обратном направлении дырки в  $p$ -области будут двигаться от границы раздела, и электроны из  $n$ -области также будут двигаться от границы раздела. На границе раздела областей в итоге не останется основных носителей тока. Ток на этой границе будет обеспечиваться очень малым числом неосновных носителей, образовавшихся вблизи тонкого  $p$ - $n$ -перехода. Проводимость  $p$ - $n$ -перехода будет малой.

В этом смысле говорят, что  $p$ - $n$ -переход пропускает ток преимущественно в одном направлении. В прямом направлении сила тока основных носителей увеличивается с увеличением напряжения, в обратном направлении сила тока неосновных носителей при небольших значениях напряжения практически не изменяется.

#### Пробой $p$ - $n$ -перехода.


Если продолжать увеличение напряжения обратной полярности, то при некотором напряжении  $U_C$ , называемом напряжением пробоя, произойдет *пробой*  $p$ - $n$ -перехода. Это связано с тем, что в закрытом состоянии  $p$ - $n$ -перехода почти все приложенное напряжение действует в



тонком пограничном слое. Поэтому в нем сформируется большая напряженность электрического поля, способная ускорить электрон на малом расстоянии до энергий достаточных для «выбивания» электрона из ковалентной связи; далее уже оба электрона будут ускорены, они выбьют еще электроны и так далее. Получится подобие электронной лавины, приводящей к пробую перехода. Пробую соответствует участок около  $U_C$  на вольтамперной характеристике. Этот участок вблизи  $U_C$  имеет участок плавного нарастания тока, что позволяет использовать явление пробоя, вернее предпробойное состояние для стабилизации напряжения.

Некоторые примеры применения  $p$ - $n$ -перехода в технике.

1) Выпрямление тока и детектирование сигналов. Для этих целей используют полупроводниковый диод, главная часть которого является  $p$ - $n$ -переходом.

Общее условное обозначение диода . Диодный выпрямитель или диодный мост - основной компонент блоков питания практически всех электронных устройств.



2) *Стабилизаторы напряжения.* Явление пробоя  $p$ - $n$ -перехода используют для стабилизации напряжения. Стабилитроны на основе  $p$ - $n$ -перехода изготавливаются промышленностью на разные напряжения стабилизации (пробоя) до сотен вольт.

3) *Светоиспускающие диоды.* Принцип работы светоиспускающих диодов - устройств, преобразующих энергию электрического тока в световую энергию, основан на испускании кванта электромагнитного излучения при рекомбинации дырок и электронов на границе раздела. Можно так подобрать ширины зон в полупроводнике, что будут испускаться кванты электромагнитного излучения требуемой частоты, а именно в диапазоне длин волн от инфракрасного до ультрафиолетового излучения. Светоиспускающие диоды обладают очень высоким КПД, достигающим 80%. Светоиспускающие диоды очень долговечны, так как не содержат нитей накаливания, катодов и других быстро изнашиваемых узлов, в отличие от, например, ламп накаливания или же газоразрядных ламп. Светоиспускающие диоды широко используют как миниатюрные экономичные источники света, излучающие в заданном частотном диапазоне, как заменитель сигнальных лампочек, а последнее время и как экономичные осветительные приборы.

4) *Лазерные светоиспускающие диоды.* Принцип действия лазерных светоиспускающих диодов аналогичен принципу работы светоиспускающих диодов, но с некоторыми отличиями. Инверсная населенность уровней формируется в области  $p$ - $n$ -перехода вырожденных полупроводников, когда концентрация электронов с высокой энергией из  $n$ -области значительно превосходит концентрацию электронов с низкой энергией в  $p$ -области. В качестве зеркал лазерного резонатора используют отполированные торцы самого полупроводникового кристалла, одно из них делают частично прозрачным для выхода излучения из резонатора.

Лазерные диоды - очень миниатюрны (имеют размер порядка 1 см), экономичны, обеспечивают весьма сильный световой поток, достаточный для оплавления полимерных пленок при записи информации. Лазерные диоды используют в оптических устройствах записи и чтения информации, лазерных принтерах, системах передачи информации по стекловолоконным кабелям и т.д.

5) *Источники тока на  $p$ - $n$ -переходе.* В настоящее время широко применяются источники тока на  $p$ - $n$ -переходе как генераторы электрического тока, в которых источником энергии служит: либо энергия падающего на  $p$ - $n$ -переход электромагнитного излучения - так называемые *полупроводниковые солнечные элементы*, или тепловая энергия, подводимая к  $p$ - $n$ -переходу - так называемые *полупроводниковые тепловые элементы*.

*Полупроводниковые солнечные элементы.* Принцип работы полупроводниковых солнечных элементов основан на явлении внутреннего фотоэффекта при освещении  $p$ - $n$ -перехода. Поглощенный в области  $p$ - $n$ -перехода квант создаёт пару электрон - дырка, электрическое поле перемещает дырку в  $p$ -область, а электрон - в  $n$ -область. Поэтому при облучении  $p$ - $n$ -перехода потоком квантов в  $p$ -области будут накапливаться дырки, а в  $n$ -области - электроны. Если солнечный элемент включить в замкнутую электрическую цепь, то потечет ток, который может быть использован.

Полупроводниковые солнечные элементы обычно получают в виде пластины полупроводника  $p$ -типа, на которую нанесен тонкий прозрачный слой металла, который можно считать полупроводником  $n$ -типа; затем на слой металла наносят прозрачные защитные покрытия. Световые кванты, пройдя эти покрытия и тонкий слой металла, поглощаются в области  $p$ - $n$ -перехода. Ток «отводят» от полупроводниковой пластины и от тонкого металлического покрытия. Такой элемент обеспечивает напряжение порядка долей вольта и ток порядка нескольких миллиампер. Обычно элементы соединяют в батарею (солнечная батарея), используя последовательное и параллельное соединение элементов.

*Полупроводниковые тепловые элементы.* Принцип работы полупроводниковых тепловых элементов полностью аналогичен работе полупроводниковых солнечных элементов с тем отличием, что в области  $p$ - $n$ -перехода пары электрон - дырка образуются за счет его нагрева. Полупроводниковые тепловые элементы обычно соединяют последовательно в батарее. При

этом  $p$ - $n$ -переходы, нагреваемые каким либо источником тепла, оказываются с одной стороны конструкции, а  $p$ - $n$ -переходы, охлаждаемые обычно водой или потоком воздуха, - с другой.

*Полупроводниковые охладители.* Принцип действия основан на поглощении энергии при образовании пары электрон-дырка. Полупроводниковые холодильники широко применяются в технике, когда надо создать миниатюрный легкий холодильник, например, в системах охлаждения датчиков инфракрасного излучения, полупроводниковых лазеров и т.д.

б) *Полупроводниковый транзистор.* Если соединить три области полупроводника с разными типами основных носителей, то возможно создание прибора способного усиливать сигналы, токи и напряжения, так называемого полупроводникового *транзистора*. В зависимости от того, как чередуются области, транзисторы бывают двух типов:  $p$ - $n$ - $p$  и  $n$ - $p$ - $n$ .

По сравнению с радиолампами транзисторы более компактны (сейчас транзисторы, входящие в состав микросхем, имеют размеры порядка микрометра, а одна микросхема содержит до  $10^6$ - $10^8$  транзисторов). Транзисторы прочны (так как не содержат сеток и стеклянных деталей), долговечны (так как не содержат сильно нагретых деталей) и технологичны (транзисторы, входящие в состав микросхем, производят напылением и отжигом сразу по  $10^5$ - $10^8$  и более штук).

К недостаткам полупроводниковых транзисторов и других полупроводниковых приборов следует отнести их чувствительность к перегреву и, особенно, радиации. Поэтому устройства, предназначенные для работы в условиях сильной радиации, до сих пор иногда конструируют, используя радиолампы.

В заключении отметим, что появление полупроводникового транзистора произвело самую большую техническую революцию в двадцатом веке, поскольку появилась возможность создавать компактные и надежные элементы компьютеров и другой электронной техники, без которых жизнь в наше время оказалась бы просто немыслимой. Важно заметить, что «родились» транзисторы в результате, казалось бы, очень далеких от практических нужд физических исследований характеристик полупроводников - веществ, которые плохо проводят электрический ток и потому, как тогда принято было считать, не найдут широкого применения.

#### Контакт металла и полупроводника

В современных полупроводниковых приборах помимо контактов с электронно-дырочным переходом применяются также контакты между металлом и полупроводником. Процессы в таких переходах зависят работы выхода электронов. Чем меньше работа выхода, тем больше электронов может выйти из данного тела. Рассмотрим процессы в различных метало-полупроводниковых переходах.

1) Если в контакте металла с полупроводником  $n$ -типа работа выхода электронов из металла  $A_M$  меньше, чем работа выхода из полупроводника  $A_P$ , то будет преобладать выход электронов из металла в полупроводник. Поэтому в слое полупроводника около границы накапливаются основные носители заряда (электроны). Сопротивление этого слоя будет малым при любой полярности приложенного напряжения, и, следовательно, такой переход не обладает выпрямляющими свойствами. Его называют *невыпрямляющим (омическим)* контактом.

Подобный же невыпрямляющий диод получается в контакте металла с полупроводником  $p$ -типа, если работа выхода электронов из полупроводника меньше, чем из металла. В этом случае из полупроводника в металл уходит больше электронов, чем в обратном направлении, и в приграничном слое полупроводника также образуется область, обогащенная основными носителями (дырками), имеющая малое сопротивление.

Оба типа невыпрямляющих контактов широко используются в полупроводниковых приборах при устройстве выводов от  $n$ - и  $p$ -областей. Для этой цели подбирают соответствующие металлы.

2) Если в контакте металла с полупроводником  $n$ -типа  $A_P < A_M$ , то электроны будут переходить главным образом из полупроводника в металл и в приграничном слое полупроводника образуется область, обедненная основными носителями, и поэтому имеющая большое сопротивление.

Здесь создается довольно высокий потенциальный барьер, высота которого будет существенно меняться в зависимости от полярности приложенного напряжения. Такой переход обладает выпрямляющими свойствами. Подобные переходы в свое время исследовал немецкий ученый В. Шотки и теперь барьеры в таких переходах именуются *барьерами Шотки*, а диоды с этим барьером - *диодами Шотки*. В диодах Шотки (в металле, куда приходят электроны из полупроводника) отсутствуют процессы накопления и рассасывания зарядов неосновных носителей, характерные для *p-n*-переходов. Поэтому диоды Шотки обладают значительно более высоким быстродействием, нежели обычные диоды, так как накопление и рассасывание зарядов - процессы инерционные, т. е. требуют времени.

Аналогичными свойствами обладает контакт металла с полупроводником *p*-типа при  $A_M < A_P$ .

#### Контакт двух проводников.

При контакте двух проводников (металлов) также может появиться контактная разность потенциалов, вызванная разностью энергий Ферми. В металлах это приводит к возникновению термодинамических явлений.

*Термоэлектрические явления*, совокупность физических явлений, обусловленных взаимосвязью между тепловыми и электрическими процессами в металлах (и полупроводниках). Термоэлектрическими явлениями являются эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона.

*Эффект Зеебека* состоит в том, что в замкнутой цепи, состоящей из разнородных проводников, возникает ЭДС (термо-ЭДС), если места контактов поддерживают при разных температурах. В простейшем случае, когда электрическая цепь состоит из двух различных проводников, она называется термоэлементом, или *термопарой*. Величина термо-ЭДС зависит только от температур горячего  $T_2$  и холодного  $T_1$  контактов и от материала проводников. В небольшом интервале температур термо-ЭДС можно считать пропорциональной разности температур  $\mathcal{E} = \alpha \cdot (T_2 - T_1)$ . Коэффициент  $\alpha$  называется *термоэлектрической способностью пары* (термособильностью, коэффициентом термо-ЭДС, или удельной термо-ЭДС). Он определяется материалами проводников, но зависит также от интервала температур; в некоторых случаях с изменением температуры  $\alpha$  меняет знак.

Качественное объяснение явления возникновения термо-ЭДС можно следующим образом. При контакте двух металлов с разной энергией Ферми  $E_{1F} > E_{2F}$ , электроны из области с большей энергией Ферми начнут переход в область с меньшей энергией до тех пор, пока энергия Ферми на границе не примет одинаковые значения. При этом электроны перенесут отрицательный электрический заряд, что вызовет появление электрического поля в области контакта, препятствующего движению электронов. Следовательно, в области контакта появится контактная разность потенциалов  $U = \frac{E_{1F} - E_{2F}}{e}$ . Концентрации свободных электронов по обе стороны от зоны контакта можно приближённо оценить через разность потенциалов соотношением

$n_2 = n_1 e^{\frac{eU}{kT}}$ , поэтому  $U = \frac{kT}{e} \ln \frac{n_1}{n_2}$ . Рассматривая замкнутую цепь из двух проводников, контакты которых находятся при разных температурах  $T_1$  и  $T_2$ , получает суммарную термо-ЭДС цепи

$$\Delta U = U_2 - U_1 = \frac{k}{e} \ln \frac{n_1}{n_2} (T_2 - T_1).$$

Термопары применяют для измерения температуры. Батареи термопар используют как источники ЭДС для питания физических приборов.

*Эффект Пельтье* обратен явлению Зеебека в следующем смысле. При протекании тока в цепи из различных проводников, в местах их контактов, в дополнение к теплоте по закону Джоуля-Ленца, выделяется или поглощается, в зависимости от направления тока, некоторое количество теплоты  $Q$ , пропорциональное протекающему через контакт количеству электриче-

ства (то есть силе тока  $I$  и времени  $t$ ):  $Q = \Pi \cdot I \cdot t$ . Коэффициент Пельтье  $\Pi$  зависит от природы находящихся в контакте материалов и температуры.

Причина возникновения явления Пельтье заключается в следующем. На контакте двух веществ имеется контактная разность потенциалов, которая создаёт внутреннее контактное поле. Если через контакт протекает электрический ток, то это поле будет либо способствовать прохождению тока, либо препятствовать. Если ток идёт против контактного поля, то внешний источник должен затратить дополнительную энергию, которая выделяется в контакте, что приведёт к его нагреву. Если же ток идёт по направлению контактного поля, то он может поддерживаться этим полем, которое и совершает работу по перемещению зарядов. Необходимая для этого энергия отбирается у вещества, что приводит к охлаждению его в месте контакта.

*Эффект Томсона* - одно из термоэлектрических явлений, заключающееся в том, что в однородном неравномерно нагретом проводнике с постоянным током, дополнительно к теплоте, выделяемой в соответствии с законом Джоуля - Ленца, в объёме проводника будет выделяться или поглощаться дополнительная *теплота Томсона* в зависимости от направления тока. Количество теплоты Томсона пропорционально силе тока, времени и перепаду температур, зависит от направления тока.

Объяснение эффекта в первом приближении заключается в следующем. Если вдоль проводника, по которому протекает ток, существует градиент температуры, причём направление тока соответствует движению электронов от горячего конца к холодному, то при переходе из более горячего сечения в более холодное, электроны передают избыточную энергию окружающим атомам (выделяется теплота), а при обратном направлении тока, проходя из более холодного участка в более горячий, пополняют свою энергию за счёт окружающих атомов (теплота поглощается).

Таким образом, причина всех термодинамических явлений - нарушение теплового равновесия в потоке носителей (то есть отличие средней энергии электронов в потоке от энергии Ферми). Абсолютные значения всех термоэлектрических коэффициентов растут с уменьшением концентрации носителей; поэтому в полупроводниках они в десятки и сотни раз больше, чем в металлах и сплавах.

## Лекция 23. Структура атомного ядра.

*Характеристики ядра: заряд, масса, энергия связи, спин и магнитный момент. Свойства и обменный характер ядерных сил. Деление тяжелых ядер и цепные реакции. Термоядерный синтез.*

## Атомное ядро.

В 1911 году Резерфорд на основании результатов своих опытов по рассеянию заряженных  $\alpha$ -частиц установил, что атом состоит из тяжёлого положительного заряженного ядра, окружённого отрицательно заряженными электронами. Размер ядра много меньше размера атома. Именно с этого момента и ведёт начало ядерная физика, изучающая строение и свойства атомных ядер.

Атомное ядро - центральная часть атома, в которой сосредоточена основная его масса (~99,9%). Средние размеры ядер различных атомов имеют порядок фемтометра ( $1 \text{ фм} = 10^{-15} \text{ м}$ ), что в более чем в 100 тысяч раз меньше средних размеров самого атома ( $\sim 10^{-10} \text{ м} = 1 \text{ \AA}$  (ангстрем)).

По современной модели, предложенной в 1932 году Д.Д.Иваненко и В.Гейзенбергом, атомное ядро состоит двух видов элементарных частиц - положительно заряженных протонов и нейтральных нейтронов, которые принято называть *нуклонами*. Нуклоны в ядре связаны между собой при помощи *сильного взаимодействия*.

Количество протонов в ядре называется его *зарядовым числом Z* - это число равно порядковому номеру соответствующего химического элемента в таблице Менделеева. Количество электронов в неионизированном атоме равно зарядовому числу, в этом смысле количество протонов в ядре полностью определяет структуру электронной оболочки нейтрального атома и химические свойства соответствующего элемента.

Количество нейтронов в ядре называется его *изотопическим числом N*. Ядра с одинаковым числом протонов и разным числом нейтронов называются *изотопами*. Ядра с одинаковым числом нейтронов, но разным числом протонов называются *изотонами*. Термины изотоп и изотон используются также применительно к атомам, содержащим указанные ядра, а также для характеристики нехимических разновидностей одного химического элемента. Полное количество нуклонов в ядре называется его *массовым числом A* ( $A=N+Z$ ), приблизительно равным средней массе атома, указанной в таблице Менделеева. Ядро химического элемента *X* условно обозначается  ${}_Z^AX$  или  ${}_Z X^A$ .

Некоторые ядра имеют собственные названия. Например, ядро атома гелия  ${}_2\text{He}^4$  называется  $\alpha$ - частицей, ядро дейтерия  ${}_1\text{H}^2$  (или D) - *дейтроном*, а ядро трития  ${}_1\text{H}^3$  (или T) - *тритоном*. Последние два ядра являются изотопами водорода и поэтому могут входить в состав молекул воды, давая в итоге так называемую *тяжёлую воду*.

Атомное ядро можно приближённо считать шаром радиуса  $R \approx 1,23 \cdot A^{\frac{1}{3}} \text{ фм}$  (для  $A > 20$ ). Масса ядер в тысячи раз больше массы входящих в атом электронов и зависит от количества входящих в него частиц и энергии их связи. Плотность ядерного вещества  $\sim 10^{17} \text{ кг/м}^3$  и примерно одинаково для всех атомов.

В настоящее время обнаружено примерно 3500 атомных ядер, представляющих собой различные сочетания протонов и нейтронов. Примерно 20% из них стабильны, остальные нестабильные и подвержены радиоактивному распаду.

В природе на данный момент не встречаются естественные ядра с  $Z > 92$ , т.к. они из-за своей радиоактивности полностью распались к настоящему времени. Некоторые ядра, в частности, трансурановых элементов, были получены искусственным путём.

Атомное ядро, рассматриваемое как класс частиц с определённым числом протонов и нейтронов, принято называть *нуклидом*. Нуклиды с одинаковым массовым числом, но разным протонно-нейтронным составом принято называть *изобарами*.

*Протон* (др. греч. πρῑτος - первый, основной) - элементарная частица – ядро атома водорода. Относится к барионам, имеет спин 1/2 (фермион), электрический заряд  $+e$ . Стабилен -

нижнее ограничение на время жизни  $\sim 2,9 \cdot 10^{29}$  лет независимо от канала распада,  $\sim 1,6 \cdot 10^{33}$  лет для распада в позитрон и нейтральный пион.

Масса протона, выраженная в разных единицах, составляет  $m_p \approx 938,272$  МэВ;  $m_p \approx 1,007$  а.е.м. (атомной единицы массы);  $m_p \approx 1,672 \cdot 10^{-27}$  кг;  $m_p \approx 1836,153$  массы электрона.

Протон является ядром атома водорода (точнее, его лёгкого изотопа - протия). В физике протон обозначается буквой  $p$  (или  $p^+$ ). Химическое обозначение протона (рассматриваемого в качестве положительного иона водорода) -  $H^+$ , астрофизическое —  $H^+$ .

Измерения среднего радиуса протона с помощью атомов обычного водорода, проводимые разными методами с 1960-х годов, привели к результату  $R \approx 0,87$  фм.

*Нейтрон* - элементарная частица, не имеющая электрического заряда. Нейтрон является фермионом ( $s = \frac{1}{2}$ ) и принадлежит к классу барионов.

Открытие нейтрона принадлежит Дж. Чедвику (1932), за которое он получил Нобелевскую премию по физике в 1935 году.

Масса протона  $m_n \approx 939,565$  МэВ,  $m_n \approx 1,675 \cdot 10^{-27}$  кг,  $m_n \approx 1,009$  а. е. м., что примерно на 0,14 % больше, чем масса протона.

Нейтрон распадается в свободном состоянии. Единственным каналом распада, разрешённым законом сохранения энергии и законами сохранения электрического заряда, барионного и лептонного квантовых чисел, является бета-распад нейтрона на протон, электрон и электронное антинейтрино (а также, возможно, гамма-квант). Время жизни в свободном состоянии  $885,7 \pm 0,8$  секунды, период полураспада — 614 секунд.

Разница масс между протоном и нейтроном около 1,3 МэВ - невелика по меркам ядерной физики. В результате, в ядрах нейтрон может находиться в более глубокой потенциальной яме, чем протон, и потому бета-распад нейтрона оказывается энергетически невыгодным. Это приводит к тому, что в ядрах нейтрон может быть стабильным. Более того, в нейтронно-дефицитных ядрах происходит распад протона в нейтрон (с захватом орбитального электрона или вылетом позитрона).

Несмотря на нулевой электрический заряд, нейтрон не является истинно нейтральной частицей. Магнитный момент нейтрона  $\mu \approx 1,913$  ядерного магнетона.

#### Спин ядра.

Поскольку нуклоны обладают собственным механическим моментом, или спином, равным  $\frac{\hbar}{2}$ , то и ядра имеют механические моменты. Кроме того, нуклоны участвуют в ядре в орбитальном движении, которое также характеризуется определённым моментом количества движения каждого нуклона. Орбитальные моменты принимают только целочисленные значения  $\hbar$ . Все механические моменты нуклонов, как спиновые, так и орбитальные, суммируются алгебраически и составляют спин ядра.

Несмотря на то, что число нуклонов в ядре может быть очень велико, спины ядер обычно невелики и составляют не более нескольких  $\hbar$ , что объясняется особенностью взаимодействия нуклонов. Все парные протоны и нейтроны взаимодействуют только так, что их спины взаимно компенсируются, то есть пары всегда взаимодействуют с антипараллельными спинами. Суммарный орбитальный момент пары также всегда равен нулю. В результате ядра, состоящие из чётного числа протонов и чётного числа нейтронов, *не имеют механического момента*. Отличные от нуля спины существуют только у ядер, имеющих в своём составе непарные нуклоны, спин такого нуклона суммируется с его же орбитальным моментом и имеет какое-либо полуцелое значение:  $1/2, 3/2, 5/2$ . Ядра нечётно-нечётного состава имеют целочисленные спины: 1, 2, 3 и т.д.

#### Магнитный момент

Измерения спинов стали возможными благодаря наличию непосредственно связанных с ними магнитных моментов. Они измеряются в ядерных магнетонах  $\mu_p = \frac{e\hbar}{2m_p} \approx 5.051 \cdot 10^{-27}$

Дж/Тл и для различных ядер равны от  $-2$  до  $+5$  ядерных магнетонов. Из-за относительно большой массы нуклонов магнитные моменты ядер очень малы по сравнению с магнитными моментами электронов.

Магнитный момент чётно-чётных пар, как и спин, равен нулю. Магнитные моменты ядер с непарными нуклонами образуются собственными моментами этих нуклонов и моментом, связанным с орбитальным движением непарного протона.

Взаимодействие магнитных моментов электронов и ядра приводит к расщеплению спектральных линий излучения атома  $\Delta\lambda \sim 10^{-12}$  м, что называется *сверхтонкой структурой излучения атома*.

Как и любая квантовая система, ядра могут находиться в метастабильном возбуждённом состоянии, причём в отдельных случаях время жизни такого состояния исчисляется годами. Такие возбуждённые состояния ядер называются *ядерными изомерами*.

#### Энергия связи.

Экспериментально было обнаружено, что для всех стабильных ядер масса ядра меньше суммы масс составляющих его нуклонов, взятых по отдельности. Эта разница называется *дефектом массы* или избытком массы и определяется соотношением:

$$\Delta m = Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - m_{\text{я}}$$

где  $m_p$  и  $m_n$  - массы свободного протона и нейтрона,  $m_{\text{я}}$  - масса ядра.

Согласно принципу эквивалентности массы и энергии дефект массы представляет собой массу, эквивалентную работе, затраченной ядерными силами, чтобы собрать все нуклоны вместе при образовании ядра. Эта величина равна изменению потенциальной энергии нуклонов в результате их объединения в ядро. Энергия, эквивалентная дефекту массы, называется *энергией связи* ядра и равна:

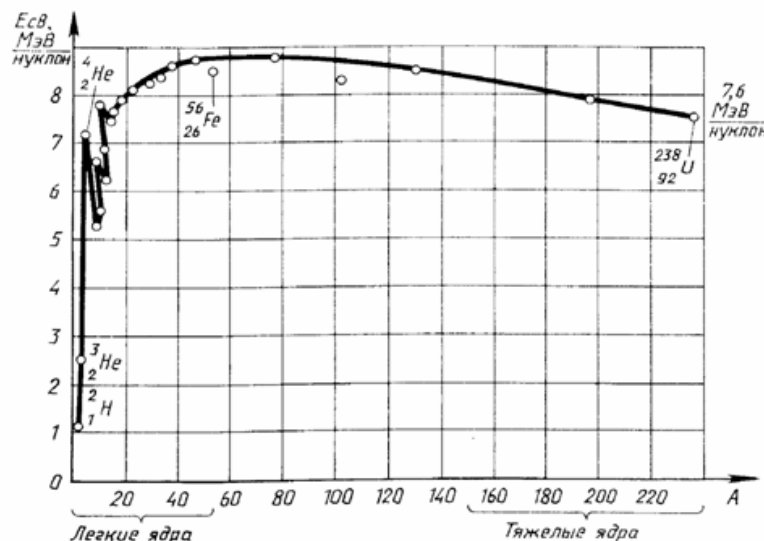
$$E_{\text{CB}} = \Delta m \cdot c^2 = [Z \cdot m_p + (A - Z) \cdot m_n - m_{\text{я}}] \cdot c^2$$

где  $c$  - скорость света в вакууме.

Другим важным параметром ядра является *удельная энергия связи* - энергия, приходящаяся на один нуклон ядра, равная отношению энергии связи ядра и числа содержащихся в нём нуклонов:

$$E_{\text{уд}} = \frac{E_{\text{CB}}}{A}.$$

Эта величина равна среднему значению энергии, которую нужно затратить, чтобы удалить один нуклон из ядра, или среднему изменению энергии связи ядра при поглощении свободного протона или нейтрона.



Как видно из рисунка, при малых значениях массовых чисел удельная энергия связи ядер резко возрастает и достигает максимума при  $A \approx 50 \div 60$  (примерно 8,8 МэВ). Нуклиды с такими

массовыми числами наиболее устойчивы. С дальнейшим ростом  $A$  средняя энергия связи немного уменьшается. Так для ядра урана  ${}_{92}\text{U}^{238}$  удельная энергия связи примерно равна 7,5 МэВ/нуклон.

Такой характер поведения средней энергии связи указывает на свойство ядерных сил достигать *насыщения*, то есть на возможность взаимодействия нуклона только с малым числом «партнёров». Если бы ядерные силы не обладали свойством насыщения, то в пределах радиуса действия ядерных сил каждый нуклон взаимодействовал бы с каждым из остальных нуклонов. Тогда энергия взаимодействия была бы пропорциональна  $A \cdot (A-1)$ , а средняя энергия связи одного нуклона не была бы постоянной у разных ядер, а возрастала бы с ростом  $A$ .

Энергия связи нуклонов в ядре в миллионы раз больше энергии связи электронов в атомах. Таким образом, в ядре запасена огромная ядерная энергия, в миллионы раз превышающая энергию, выделяющуюся в химических реакциях.

Из факта убывания средней энергии связи для нуклидов с массовыми числами больше или меньше 50-60 следует, что для ядер с малыми  $A$  энергетически выгоден процесс слияния - *термоядерный синтез*, приводящий к увеличению массового числа, а для ядер с большими  $A$  - *процесс деления*. Так деление одного ядра с массовым числом  $A=240$  на два одинаковых осколка привело бы к выделению энергии 240 МэВ, а слияние двух ядер дейтерия в одно ядро гелия высвободило бы энергию в 24 МэВ. Для примера – сгорание углерода – химическая реакция  $\text{C} + \text{O}_2 = \text{CO}_2$  сопровождается выделением энергии 5 эВ.

### Ядерные силы.

Большая энергия связи нуклонов, входящих в ядро, говорит о существовании *ядерных сил*, поскольку гравитационные силы между нуклонами слишком малы, чтобы преодолеть взаимное электростатическое отталкивание протонов в ядре. Ядерное взаимодействие является самым интенсивным, значительно превосходящим интенсивность электромагнитных сил.

Ядерные силы являются *короткодействующими*. Характерный масштаб действия этих сил составляет  $\sim 1 \text{ фм} = 10^{-15} \text{ м}$ . На больших расстояниях ядерные силы практически не действуют, а на очень малых притяжение сменяется на отталкивание.

Т.к. в ядре удерживаются вместе заряженные протоны и нейтральные нейтроны, то ядерные силы не зависят от заряда нуклонов - как говорят, обладают *зарядовой независимостью*.

Ядерные силы не являются центральными силами. Они, например, зависят не только от расстояния между нуклонами, но и от ориентации их спинов.

Ядерные силы обладают свойством насыщения – т.е. взаимодействие осуществляется только между соседними нуклонами.

По современным представлениям связь нуклонов осуществляется силами, которые возникают вследствие непрерывного обмена частицами, называемыми *пи-мезонами*, между нуклонами в ядре. (Как говорят, ядерные силы имеют *обменный характер*). Такой обмен приводит к появлению сил взаимодействия между нуклонами, постоянно испускающими и поглощающими пи-мезоны. С классической точки зрения такой процесс невозможен, т.к. он вступает в противоречие с законом сохранения энергии. Однако в квантовой механике, как показывает соотношение неопределённости для энергии и времени, энергия системы частиц в течение некоторого промежутка времени  $\tau$  может иметь неопределённость  $\Delta E \cdot \tau = \hbar$ . Предположим, что эта неопределённость энергии равна энергии покоя появившейся частицы  $\Delta E = mc^2$ . Тогда, если время существования частицы меньше времени  $\tau = \frac{\hbar}{mc^2}$ , то эту частицу обнаружить нельзя. Такие частицы принято называть *виртуальными*.

*Замечание.* Виртуальную частицу можно обнаружить, если сообщить системе энергию, превосходящую энергию покоя этой частицы.

За время своего существования виртуальная частица должна быть испущена одним нуклоном и поглощена другим. Т.е. она должна преодолеть среднее расстояние между нуклонами.



Зная характерный масштаб  $L$  действия сил можно оценить массу покоя виртуальной частицы.

Если принять, что  $L \sim c\tau = \frac{\hbar}{mc}$ , то  $m \sim \frac{\hbar}{Lc}$ .

Оказалось, что массы пи-мезонов (или, по-другому, пионов) вполне согласуются с проведёнными выкладками. На сегодняшний день известны три вида пи-мезонов (или, как говоря, три зарядовых состояния): положительно и отрицательно заряженные  $\pi^+$  и  $\pi^-$  с массами покоя 273 масс электронов и электрически нейтральный  $\pi^0$  с массой покоя 264 массы электрона.

В свободном состоянии пи-мезоны нестабильны и распадаются. Обменный характер ядерных сил осуществляется по следующей схеме

$$p + n \leftrightarrow n + \pi^+ + n \leftrightarrow n + p,$$

$$p + n \leftrightarrow p + \pi^- + p \leftrightarrow n + p.$$

Если нуклону сообщить дополнительную энергию, не меньшую энергии покоя пи-мезона, то виртуальный пи-мезон может превратиться в реальный, который можно обнаружить экспериментально.

*Замечание.* Существование магнитного момента у нейтрона можно объяснить тем, что нейтрон часть времени проводит в виртуальном состоянии  $n \leftrightarrow p + \pi^-$ . Орбитальное движение отрицательного пи-мезона и обуславливает наличие магнитного момента.

### Модели атомного ядра

При построении моделей атомного ядра возникает ряд проблем, связанных с недостаточностью знаний о силах между нуклонами и сложностью решения квантовой задачи многих тел. Поэтому при построении конкретных моделей выделяется интересующий круг явлений и свойств.

*Капельная модель ядра* - одна из самых ранних моделей строения атомного ядра. Предложена Нильсом Бором в 1936 году в рамках теории составного ядра, затем развита Яковом Френкелем и, в дальнейшем, Джоном Уиллером. На основании этой модели Карл Вайцзеккер впервые получил полуэмпирическую формулу для энергии связи ядра атома, названную в его честь *формулой Вайцзеккера*.

Согласно этой теории, атомное ядро можно представить в виде сферической равномерно заряженной капли из особой ядерной материи, которая обладает некоторыми свойствами, например несжимаемостью, насыщением ядерных сил, «испарением» нуклонов, чем напоминает жидкость. Поэтому на такое ядро-каплю можно распространить некоторые другие свойства капли жидкости, например поверхностное натяжение, дробление капли на более мелкие или слияние мелких капель в одну большую, что позволило смоделировать процессы деления и синтеза ядер.

*Оболочечная модель ядра* - модель, объясняющая структуру атомного ядра по аналогии с теорией оболочечного строения атома.

Согласно этой модели, каждый нуклон находится в ядре в определённом индивидуальном квантовом состоянии, характеризуемом энергией, моментом вращения и орбитальным моментом вращения. Всякий раз, когда количество нуклонов достигает числа, отвечающего за заполнению очередной оболочки (такие числа называются *магическими*), возникает возможность скачкообразного изменения некоторых характеризующих ядро величин (в частности, энергии связи). Это создаёт подобие периодичности в свойствах ядер в зависимости от  $A$  и  $Z$ , аналогичной периодическому закону для атомов. В обоих случаях физической причиной периодичности является принцип Паули, запрещающий двум тождественным фермионам находиться в одном и том же состоянии. Однако оболочечная структура у ядер проявляется значительно слабее, чем в атомах. Происходит это главным образом потому, что в ядрах индивидуальные квантовые состояния частиц («орбиты») возмущаются взаимодействием («столкновениями») их друг с другом гораздо сильнее, чем в атомах.

При увеличении количества нуклонов в ядре существуют определённые числа, при которых энергия связи следующего нуклона намного меньше, чем последнего. Особой устойчиво-

стью отличаются атомные ядра, содержащие протоны в количествах, равных *магическим числам* 2, 8, 20, 28, 50, 82, 114, 126, 164 и нейтроны в количествах 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 184, 196, 228, 272, 318.

Т.к. оболочки существуют отдельно для протонов и нейтронов, то можно говорить о «магическом ядре», в котором количество нуклонов одного типа является магическим числом, или о «дважды магическом ядре», в котором магическими числами являются количества нуклонов обоих типов.

Магические ядра являются наиболее устойчивыми. Это объясняется в рамках оболочечной модели тем, что протонные и нейтронные оболочки в таких ядрах полностью заполнены (по аналогии с электронными оболочками у атомов благородных газов).

Числа, которые являются магическими и для протонов и для нейтронов называют *дважды магическими*: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. «Дважды магические» ядра — наиболее устойчивые изотопы. Таких ядер на сегодняшний день известно пять.

Ядро	${}^4_2\text{He}$	${}^{16}_8\text{O}$	${}^{40}_{20}\text{Ca}$	${}^{48}_{20}\text{Ca}$	${}^{208}_{82}\text{Pb}$
Z	2	8	20	20	82
N	2	8	20	28	126

Примером особой устойчивости дважды магического ядра является тот факт, что например, ядро атома гелия ( $\alpha$ -частица) – единственная составная частица, испускаемая тяжёлыми ядрами при  $\alpha$ -распаде.

Наличие магических чисел позволяет прогнозировать существование так называемых «островов стабильности» - значений массовых и зарядовых чисел, при которых ядра трансурановых элементов, получаемые искусственно, будут относительно стабильными.

### Ядерные реакции.

*Ядерная реакция* – это процесс сильного взаимодействия атомного ядра с элементарными частицами или другими ядрами, приводящий к преобразованию ядра. Взаимодействия частиц с ядром возможно при их сближении на расстояния порядка  $10^{-15}$  м.

Реакции, вызываемые не очень быстрыми частицами (с энергией не более 10 МэВ), протекают в два этапа. На первом этапе ядро  $X$  захватывает приблизившуюся частицу  $a$  и образует новое составное ядро  $\Pi$ . На втором этапе составное ядро испускает частицу  $b$  и превращается в ядро  $Y$



Распад составного ядра  $\Pi$  не зависит от этапа захвата.

Если начальная и конечная частицы одинаковые  $a \equiv b$ , то данная реакция называется (потенциальным) *рассеянием* частицы на ядре.

Реакции, вызванные быстрыми частицами протекают без образования промежуточного ядра и называются *прямым ядерным взаимодействием*.

Характерное время ядерной реакции – отношение диаметра ядра к скорости света

$$\tau_{\text{я}} = \frac{d_{\text{я}}}{c} \sim 10^{-22} \div 10^{-23} \text{ с.}$$

При ядерных реакциях выполняются все законы сохранения классической физики. Эти законы накладывают ограничения на возможность осуществления ядерной реакции. Даже энергетически выгодный процесс всегда оказывается невозможным, если сопровождается нарушением какого-либо закона сохранения.

Переход в невозбуждённое состояние может осуществляться различными путями, называемыми *каналами реакции*. Типы и квантовое состояние налетающих частиц и ядер до начала реакции определяют *входной канал* реакции. После завершения реакции совокупность образовавшихся продуктов реакции и их квантовых состояний определяет *выходной канал* реакции. Реакция полностью характеризуется входным и выходным каналами.

Вероятность реакции определяется так называемым *ядерным сечением реакции*. В лабораторной системе отсчёта (где ядро-мишень покоится) вероятность взаимодействия в единицу времени равна произведению сечения (выраженного в единицах площади) на поток падающих

частиц (выраженный в количестве частиц, пересекающих за единицу времени единичную площадку). Если для одного входного канала могут осуществляться несколько выходных каналов, то отношения вероятностей выходных каналов реакции равно отношению их сечений. В ядерной физике сечения реакций обычно выражаются в специальных единицах – *барнах*.

$$1 \text{ барн} = 10^{-28} \text{ м}^2.$$

### Деление ядер

Деление ядра - процесс расщепления атомного ядра на два (реже три) ядра, называемых *осколками деления*. В результате деления могут возникать и другие продукты реакции: лёгкие ядра (в основном альфа-частицы), нейтроны и гамма-кванты. Деление бывает *спонтанным* (самопроизвольным) и *вынужденным* (в результате взаимодействия с другими частицами, прежде всего, с нейтронами). Деление тяжёлых ядер - экзотермический процесс, в результате которого высвобождается большое количество энергии в виде кинетической энергии продуктов реакции, а также излучения. Деление ядер служит источником энергии в ядерных реакторах и ядерном оружии.

Деление атомных ядер было открыто при бомбардировке нейтронами ядер урана. Процесс деления ядер был открыт в 1939 году Отто Ганом и Фрицем Штрассманом.

Процесс деления может протекать только в том случае, когда потенциальная энергия начального состояния делящегося ядра превышает сумму масс осколков деления. Поскольку удельная энергии связи тяжёлых ядер уменьшается с увеличением их массы, это условие выполняется почти для всех ядер с массовым числом  $A > 90$ .

Однако, как показывает опыт, даже самые тяжёлые ядра делятся самопроизвольно с очень малой вероятностью. Это означает, что существует энергетический барьер (барьер деления), препятствующий делению.

Для реализации процесса деления с большой вероятностью ядро должно получить извне энергию, превышающую значение барьера деления. Такую энергию можно передать ядру различными способами (облучение гамма-квантами, бомбардировка частицами и др.). Из всех возможных способов практическое применение нашёл лишь один - образование возбуждённого составного ядра путём присоединения к исходному ядру нейтрона, вклад других способов деления в ядерных реакторах (в том числе фотоделение гамма-квантами) составляет меньше 1%.

Деление нейтронами имеет огромное преимущество по сравнению с другими по двум причинам:

- пороговое значение кинетической энергии для нейтрона меньше, чем для гамма-кванта, приблизительно на величину энергии связи нейтрона в составном ядре;
- деление ядер нейтронами сопровождается испусканием нейтронов, что создаёт основу для протекания цепной реакции деления.

Если минимальное значение энергии составного ядра больше энергии связи нейтрона в этом ядре, то деление ядер возможно нейтронами с любой сколь угодно малой кинетической энергией. К этой группе относятся ядра с нечётным числом нейтронов (присоединяемый нейтрон - чётный):  $^{233}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ , которые принято называть *делящимися*.

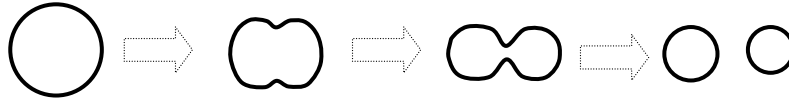
Если минимальное значение энергии составного ядра меньше энергии связи нейтрона в этом ядре, то деление ядер возможно лишь нейтронами с кинетической энергией, превышающей некое пороговое значение. К этой группе относятся ядра с чётным числом нейтронов (присоединяемый нейтрон - нечётный):  $\text{Th}^{232}$ ,  $\text{U}^{238}$ . Значение пороговых энергий примерно равны 1,2 МэВ для  $^{232}\text{Th}$  и 1 МэВ для  $^{238}\text{U}$ .

Для описания процесса деления ядер, включая вычисление барьера деления, используется несколько моделей, но ни одна из них не позволяет объяснить процесс полностью.

Традиционно механизм деления рассматривается в рамках капельной модели ядра. Для деления с большой вероятностью тяжёлое ядро должно получить энергию извне, превышающую значение барьера деления. Так, после присоединения нейтрона ядро обладает энергией возбуждения, равной сумме энергии отделения нейтрона и кинетической энергии захваченного

нейтрона. Этой дополнительной энергии может быть достаточно, чтобы ядро перешло в возбуждённое состояние с интенсивными колебаниями.

При делении ядра процесс происходит аналогично делению капли жидкости, только при делении ядра существует электростатическое отталкивание протонов, действующее как дополнительный фактор против ядерных сил, удерживающих нуклоны в ядре. Если ядро находится в



возбуждённом состоянии, то оно совершает колебательные движения, связанные с отклонениями его формы от сферической. Максимальная деформация увеличивается с ростом энергии возбуждения и при некотором её значении может превысить критическое значение, что приведёт к разрыву исходной капли и образованию двух новых. Колебательные движения возможны под действием сил поверхностного натяжения (аналог ядерных сил в капельной модели ядра) и кулоновских. Ядра, образовавшиеся после деления исходного ядра, разлетаются в противоположные стороны под действием кулоновских сил отталкивания, и потенциальная энергия кулоновского взаимодействия превращается в кинетическую.

Часть энергии деления переходит в энергию возбуждения осколков деления, которые ведут себя как любые возбуждённые ядра - либо переходят в основные состояния, излучая  $\gamma$ -кванты, либо испускают нуклоны и превращаются в новые ядра.

Чаще всего испускаемым нуклоном является нейтрон, так как ему не нужно преодолевать кулоновский барьер при вылете из ядра, а для осколков деления это ещё вероятнее, так как они перегружены нейтронами, что приводит к понижению энергии связи последних. В результате практически мгновенно после деления составного ядра осколки деления испускают два или три нейтрона, которые принято называть *мгновенными*.

Образовавшиеся ядра по-прежнему находятся в возбуждённых состояниях, однако в каждом из них энергия возбуждения меньше энергии связи нейтрона, поэтому остатки энергии возбуждения излучаются в виде  $\gamma$ -квантов спустя  $10^{-14}$ – $10^{-9}$  секунды с момента испускания нейтронов, такие  $\gamma$ -кванты также называются *мгновенными*.

В дальнейшем движение осколков деления не связано с их превращениями. Так как они увлекают за собой не все электроны исходного атома, то из них образуются многозарядные ионы, кинетическая энергия которых тратится на ионизацию и возбуждение атомов среды, что вызывает их торможение. В результате ионы превращаются в нейтральные атомы с ядрами в основных энергетических состояниях. Такие атомы называются *продуктами деления*.

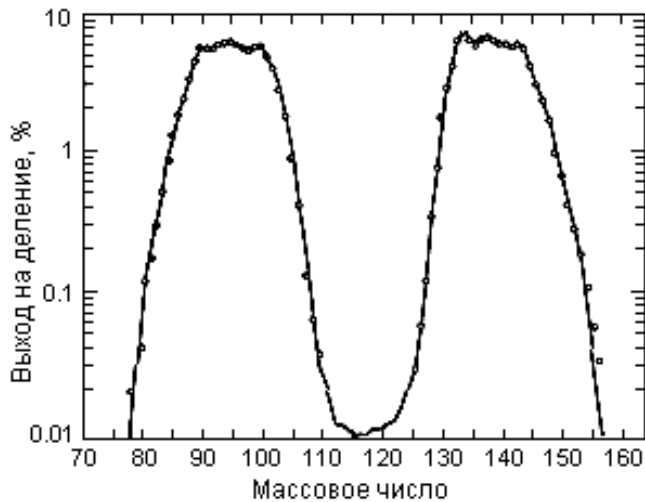
В результате  $\beta^-$ -распадов могут образовываться ядра в возбуждённых состояниях, которые переходят в основные состояния путём излучения  $\gamma$ -квантов либо, крайне редко, превращаются в другие ядра путём испускания нейтронов. Такие нейтроны называются *запаздывающими*.

При делении тяжёлого ядра выделяется примерно 200 МэВ и более 80% этой энергии составляет кинетическая энергия осколков деления. Остальная часть распределяется между нейтронами,  $\gamma$ -квантами, электронами и антинейтрино. При этом соотношение между отдельными составляющими энергии деления слабо зависит от делящегося ядра и от энергии нейтрона, вызывающего процесс деления. Около 5% всей энергии деления уносится с антинейтрино и не может быть использовано.

Энергия осколков деления, мгновенных  $\gamma$ -квантов и нейтронов превращается в тепло практически мгновенно. Энергия  $\beta^-$ -распада, составляющая примерно 7% всей энергии деления, выделяется постепенно в течение длительного времени, так как  $\beta^-$ -распады происходят значительно позже момента деления ядра. Это запаздывание приводит к так называемому остаточному энерговыделению в остановленном ядерном реакторе, которое (в случае его работы на большой мощности) после остановки настолько велико, что необходимо принимать меры для охлаждения реактора. Отработавшее в реакторе ядерное топливо обладает настолько большой

радиоактивностью и, соответственно, остаточным энерговыделением, что требует длительной (по нескольку лет) выдержки в специальных бассейнах с охлаждением.

При делении  $^{235}\text{U}$  тепловыми нейтронами образуется около 30 различных пар осколков, преимущественно неравной массы. Самый лёгкий из них имеет массовое число 72, самый тяжёлый - 161. Наиболее вероятно деление на осколки с отношением масс 3/2. Кривые выхода осколков деления слабо различаются для разных делящихся ядер, это говорит о том, что асимметрия в распределении осколков присуща самому механизму деления ядер.



Деление на неравные части объясняется в рамках оболочечной модели ядра как результат преимущественного образования ядер с заполненными оболочками, содержащими 50 и 82 нейтронов (магические числа). Однако асимметрия деления уменьшается при увеличении энергии возбуждения делящегося ядра и при больших её значениях исчезает.

Испускание нейтронов осколками деления - одна из важнейших особенностей процесса деления тяжёлых ядер. Именно она позволяет создать при определённых условиях цепную реакцию деления.

Цепная ядерная реакция - последовательность единичных ядерных реакций, каждая из которых вызывается частицей, появившейся как продукт реакции на предыдущем шаге последовательности. Механизм цепной реакции при ядерных превращениях могут обеспечить нейтроны, не имеющие кулоновского барьера и возбуждающие ядра при поглощении. Появление в среде необходимой частицы вызывает цепь следующих, одна за другой реакций, которая продолжается до обрыва цепи вследствие потери частицы-носителя реакции. Основных причин потерь две: поглощение частицы без испускания вторичной и уход частицы за пределы объёма вещества, поддерживающего цепной процесс. Если в каждом акте реакции появляется только одна частица-носитель, то цепная реакция называется *неразветвлённой*. Неразветвлённая цепная реакция не может привести к энерговыделению в больших масштабах.

Если в каждом акте реакции или в некоторых звеньях цепи появляется более одной частицы, то возникает *разветвленная* цепная реакция, ибо одна из вторичных частиц продолжает начатую цепь, а другие дают новые цепи, которые снова ветвятся. Правда, с процессом ветвления конкурируют процессы, приводящие к обрывам цепей, и складывающаяся ситуация порождает специфические для разветвленных цепных реакций предельные или критические явления. Если число обрывов цепей больше, чем число появляющихся новых цепей, то цепная самоподдерживающаяся реакция оказывается невозможной. Даже если её возбудить искусственно, введя в среду какое-то количество необходимых частиц, то, поскольку число цепей в этом случае может только убывать, начавшийся процесс быстро затухает. Если же число образующихся новых цепей превосходит число обрывов, цепная реакция быстро распространяется по всему объёму вещества при появлении хотя бы одной начальной частицы.

Область состояний вещества с развитием цепной самоподдерживающейся реакции отделена от области, где цепная реакция вообще невозможна, *критическим состоянием*. Критическое состояние характеризуется равенством между числом новых цепей и числом обрывов.

Достижение критического состояния определяется рядом факторов. Деление тяжёлого ядра возбуждается одним нейтроном, а в результате акта деления появляется более одного нейтрона (например, для  $^{235}\text{U}$  число нейтронов, родившихся в одном акте деления, в среднем равно 2,5). Следовательно, процесс деления может породить разветвленную цепную реакцию, носителями которой будут служить нейтроны. Если скорость потерь нейтронов (захватов без деления,

вылетов из реакционного объёма и т.д.) компенсирует скорость размножения нейтронов таким образом, что эффективный коэффициент размножения нейтронов в точности равен единице, то цепная реакция идёт в стационарном режиме. Введение отрицательных обратных связей между эффективным коэффициентом размножения и скоростью энерговыделения позволяет осуществить управляемую цепную реакцию, которая используется, например, в ядерной энергетике.

Если коэффициент размножения нейтронов больше единицы, цепная реакция развивается лавинообразно и становится неуправляемой. Неуправляемая цепная реакция деления используется в ядерном оружии.

*Критическая масса* - количество делящегося вещества, необходимое для начала самоподдерживающейся цепной реакции деления. Коэффициент размножения нейтронов в таком количестве вещества больше единицы или равен единице. Размеры, соответствующие критической массе, также называют *критическими*. Если масса вещества ниже критической, то слишком много нейтронов, необходимых для реакции деления, теряется, и цепная реакция не идёт. При массе больше критической цепная реакция может лавинообразно ускоряться, что приводит к ядерному взрыву.

Величина критической массы зависит от свойств вещества (таких, как сечения деления и радиационного захвата), от плотности, количества примесей, формы изделия, а также от окружения. Например, наличие отражателей и замедлителей нейтронов может сильно уменьшить критическую массу. Минимальную критическую массу имеет образец сферической формы, так как площадь его поверхности наименьшая. Критическая масса чистого металлического плутония-239 сферической формы 11 кг (диаметр такой сферы 10 см), урана-235 – 50 кг (диаметр сферы 17 см). Критическая масса также зависит от химического состава образца.

При расчётах и производстве ядерного и термоядерного оружия параметр критической массы существенным образом влияет как на конструкцию взрывного устройства, так и на его стоимость и сроки хранения. В случае проектирования и строительства атомного реактора, параметры критической массы также ограничивают как минимальные, так и максимальные размеры будущего реактора.

### Ядерная реакция синтеза

*Термоядерная реакция* (синоним: ядерная реакция синтеза) - разновидность ядерной реакции, при которой лёгкие атомные ядра объединяются в более тяжёлые ядра.

Для того чтобы произошла реакция синтеза, исходные ядра должны преодолеть силу электростатического отталкивания, для этого они должны иметь большую кинетическую энергию. Если предположить, что кинетическая энергия ядер определяется их тепловым движением, то можно сказать, что для реакции синтеза нужна большая температура. Поэтому реакция названа «термоядерной».

Атомные ядра имеют положительный электрический заряд. На больших расстояниях их заряды могут быть экранированы электронами. Однако для того, чтобы произошло слияние ядер, они должны сблизиться на расстояние, на котором действует сильное взаимодействие. Это расстояние — порядка размера самих ядер и во много раз меньше размера атома. На таких расстояниях электронные оболочки атомов (даже если бы они сохранились) уже не могут экранировать заряды ядер, поэтому они испытывают сильное электростатическое отталкивание. Сила этого отталкивания, в соответствии с законом Кулона, обратно пропорциональна квадрату расстояния между зарядами. На расстояниях порядка размера ядер величина сильного взаимодействия, которое стремится их связать, начинает быстро возрастать и становится больше величины кулоновского отталкивания.

Таким образом, чтобы вступить в реакцию, ядра должны преодолеть потенциальный барьер. Например, для реакции дейтерий-тритий величина этого барьера составляет примерно 0,1 МэВ. Для сравнения, энергия ионизации водорода - 13 эВ. Поэтому вещество, участвующее в термоядерной реакции, будет представлять собой практически полностью ионизированную плазму.

Кинетической энергии теплового движения 0,1 МэВ соответствует температура примерно  $10^9$  К. Однако есть два эффекта, которые снижают температуру, необходимую для термоядерной реакции. Во-первых, температура характеризует лишь среднюю кинетическую энергию, поэтому есть частицы как с меньшей энергией, так и с большей. На самом деле в термоядерной реакции участвует небольшое количество ядер, имеющих энергию намного больше средней (т. н. «хвост максвелловского распределения»). Во-вторых, благодаря квантовым эффектам, ядра не обязательно должны иметь энергию, превышающую кулоновский барьер. Если их энергия немного меньше барьера, они могут с большой вероятностью туннелировать сквозь него. Этот же факт туннелирования используется в мюонном катализе реакций ядерного синтеза.

Естественными термоядерными реакторами являются звёзды. Нуклеосинтез в астрофизике - процесс синтеза ядер химических элементов тяжелее водорода. Различают *первичный нуклеосинтез*, проходивший на начальных стадиях существования Вселенной в процессе Большого Взрыва и *звёздный нуклеосинтез*.

В процессе первичного нуклеосинтеза образуются элементы не тяжелее лития. Синтез более тяжёлых ядер происходит в звёздах. Лёгкие ядра (до углерода  $^{12}\text{C}$  включительно) могут синтезироваться в недрах относительно немассивных звёзд. Ядра до железа  $^{56}\text{Fe}$  синтезируются путём слияния более лёгких ядер в недрах массивных звёзд, синтез тяжёлых и сверхтяжёлых ядер идёт путём нейтронного захвата в предсверхновых звёздах и при взрывах *сверхновых*.

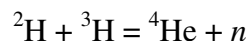
Применение реакции ядерного синтеза как практически неисчерпаемого источника энергии связано в первую очередь с перспективой освоения технологии *управляемого синтеза*. В настоящее время научная и технологическая база не позволяет использовать УТС в промышленных масштабах.

Вместе с тем, неуправляемая термоядерная реакция нашла своё применение в военном деле. Впервые термоядерное взрывное устройство было испытано в ноябре 1952 года в США, а уже в августе 1953 года в Советском Союзе испытали термоядерное взрывное устройство в виде авиабомбы. Мощность термоядерного взрывного устройства (в отличие от атомного) ограничена лишь количеством используемого для его создания материала, что позволяет создавать взрывные устройства практически любой мощности.

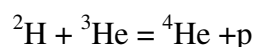
*Управляемый термоядерный синтез* (УТС) - синтез более тяжёлых атомных ядер из более лёгких с целью получения энергии, который, в отличие от взрывного термоядерного синтеза (используемого в термоядерных взрывных устройствах), носит управляемый характер.

Управляемый термоядерный синтез отличается от традиционной ядерной энергетики тем, что в последней используется реакция распада, в ходе которой из тяжёлых ядер получают более лёгкие ядра. В основных ядерных реакциях, которые планируется использовать в целях осуществления управляемого термоядерного синтеза, будут применяться дейтерий ( $^2\text{H}$ ) и тритий ( $^3\text{H}$ ), а в более отдалённой перспективе гелий-3 ( $^3\text{He}$ ) и бор-11 ( $^{11}\text{B}$ ).

Управляемый термоядерный синтез может использовать различные виды термоядерных реакций в зависимости от вида применяемого топлива. Самая легко осуществимая реакция - дейтерий + тритий:



при энергетическом выходе 17,6 МэВ. Такая реакция наиболее легко осуществима с точки зрения современных технологий, даёт значительный выход энергии, топливные компоненты дешевы. Недостаток - выход нежелательной нейтронной радиации. Существенно сложнее осуществить реакцию дейтерий + гелий-3



при энергетическом выходе 18,4 МэВ. Условия её достижения значительно сложнее. Гелий-3, кроме того, является редким и чрезвычайно дорогим изотопом. В промышленных масштабах в настоящее время не производится. Однако может быть получен из трития, получаемого в свою очередь на атомных электростанциях; или добыт на Луне. Запасы гелия-3 на Земле составляют в атмосфере около 50 000 т и гораздо больше в литосфере, на Луне он находится в значитель-

ном количестве: до 10 млн тонн. В то же время его можно легко получать и на Земле из широко распространённого в природе лития-6 на существующих ядерных реакторах деления.

В настоящее время управляемый термоядерный синтез ещё не осуществлён в промышленных масштабах. Строительство международного экспериментального термоядерного реактора (ITER) находится в начальной стадии.

*Термоядерный ракетный двигатель (ТЯРД)* - перспективный ракетный двигатель для космических полётов, в котором для создания тяги предполагается использовать истечение продуктов управляемой термоядерной реакции или рабочего тела, нагретого за счёт энергии термоядерной реакции.

В настоящее время предложены 2 варианта конструкции ТЯРД:

- *ТЯРД на основе термоядерного реактора с магнитным удержанием плазмы;*
- *ТЯРД на основе систем инерционного синтеза (импульсный термоядерный реактор).*

Есть мнение, что ТЯРД на инерциально-импульсном принципе слишком громоздок из-за очень больших циркулирующих в нем мощностей, при худшем, чем у ТЯРД с магнитным удержанием, удельном импульсе и тяге, что вызвано импульсно-периодическим типом его действия.



## Лекция 24. Радиоактивность.

*Закон радиоактивного распада. Активность. Естественная и искусственная радиоактивность. Виды радиоактивных излучений. Эффект Мессбауэра. Радиоактивные ряды, закон сложного распада. Источники радиоактивных излучений. Радиоизотопный анализ.*

## Радиоактивность.

Радиоактивностью называется самопроизвольное (спонтанное) превращение одних атомных ядер в другие, сопровождаемое испусканием одной или нескольких частиц.

Принято считать, что время радиоактивного распада ядер составляет не менее  $10^{-12}$  с. За это время происходит большое число разнообразных внутриядерных процессов, полностью формирующих вновь образовавшееся ядро.

Ядра, испытывающие радиоактивный распад, называются *радиоактивными*. Ядра, не участвующие в радиоактивных превращениях, называются *стабильными*. Такое деление достаточно условно, поскольку практически все ядра могут претерпевать радиоактивный распад, однако скорость распада у разных ядер неодинакова.

Радиоактивность ядер, существующих в природных условиях, называется *естественной*. Радиоактивность ядер, полученных с помощью ядерных реакций в лабораторных условиях (например, на ускорителях), называется *искусственной*. Между ними нет принципиальных отличий. И в том и в другом случае радиоактивные превращения подчиняются одним и тем же закономерностям. Распадающиеся ядра называются *материнскими*, а ядра, образующиеся в результате распада, - *дочерними*.

К радиоактивному распаду относятся  $\alpha$ -распад,  $\beta$ -распад, спонтанное деление тяжелых ядер, протонный распад и др.

$\beta$ -распад обусловлен *слабым* взаимодействием, все остальные виды радиоактивных процессов - *сильным* взаимодействием.

При радиоактивном распаде должны выполняться законы сохранения энергии, импульса, момента импульса, заряда и др.

Явление радиоактивности было открыто в 1896 г. французским физиком А. Беккерелем.

При радиоактивном распаде испускаются три вида радиоактивного излучения:

$\alpha$ -излучение,  $\beta$ -излучение и  $\gamma$ -излучение.

$\alpha$ -частицы представляют собой ядра гелия  ${}^4_2\text{He}$ ,  $\beta$ -частицы являются электронами  $e^-$ , хотя возможен  $\beta$ -распад с испусканием позитронов  $e^+$ , а  $\gamma$ -излучение представляет собой жесткое коротковолновое ( $\lambda < 10^{-10}$  м) электромагнитное излучение, испускаемое ядрами.

## Закон радиоактивного распада.

Радиоактивный распад является *принципиально статистическим* явлением. Нельзя предсказать, в какой момент времени распадется то или иное возбужденное ядро. Но можно с высокой степенью точности указать, какая часть нестабильных ядер распадется за определенный промежуток времени. Выявляемые в радиоактивном распаде закономерности носят вероятностный характер и выполняются тем точнее, чем более велико число радиоактивных ядер.

Пусть в момент времени  $t$  имеется  $N$  одинаковых радиоактивных ядер. Будем считать, что ядра распадаются независимо друг от друга. Обозначим через  $\lambda$  вероятность распада ядра в единицу времени - эта величина называется *постоянной распада*. Смысл  $\lambda$  заключается в том, что из  $N$  нестабильных ядер в единицу времени распадается в среднем  $\lambda N$  ядер. Тогда к моменту времени  $t + dt$  число радиоактивных ядер изменится (уменьшится) на

$$dN = -\lambda N dt.$$

Интегрируя по времени и считая, что постоянная распада  $\lambda$  не зависит от времени, получаем

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

где  $N$  - число нераспавшихся ядер в момент времени  $t$ ,  $N_0$  — число нераспавшихся ядер в начальный момент времени  $t = 0$ . Это соотношение выражает закон радиоактивного распада: *число нераспавшихся ядер убывает с течением времени по экспоненциальному закону*.

Число ядер, *испытанных* радиоактивный распад за время  $t$ , равно

$$N_0 - N = N_0(1 - e^{-\lambda t}).$$

Интенсивность распада, происходящего в радиоактивном препарате, характеризуется величиной, называемой *активностью*  $A$ . Активность определяется как число распадов, происходящих в радиоактивном препарате в единицу времени. Из физического смысла  $\lambda$  и определения  $A$  следует, что

$$A = \lambda N = \left| \frac{dN}{dt} \right| = \lambda N_0 e^{-\lambda t}$$

где  $A = \lambda N_0$  — активность радиоактивного препарата в момент времени  $t = 0$ .

Единицей измерения активности в СИ является *Беккерель* (Бк), равный одному распаду в секунду. Используется также внесистемная единица кюри (Ки), равная активности одного грамма изотопа радия  ${}^{226}_{88}\text{Ra}$  ( $1 \text{ Ки} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{ Бк}$ ).

Активность единицы массы радиоактивного препарата  $a = \frac{A}{m}$  называется удельной активностью.

*Периодом полураспада*  $T_{1/2}$  называется время, за которое распадается половина первоначального количества радиоактивных ядер. Согласно определению,  $\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T_{1/2}}$ . Логарифмируя

это равенство, получаем  $T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$ .

Период полураспада разных ядер лежит в очень широких пределах. Он меняется от  $10^{-6}$  с для изотопа радона  ${}^{215}_{86}\text{Rn}$  до  $14 \cdot 10^{17}$  лет для изотопа свинца  ${}^{204}_{82}\text{Pb}$ .

Найдем среднее время жизни ядра  $\tau$ . Из всех  $N_0$  ядер распадается в промежуток времени между  $t$  и  $t + dt$  количество ядер  $|dN| = \lambda N dt$ . Предположим, что среднее время жизни каждого из этих ядер равно  $\tau$ . Тогда

$$\tau = \frac{\int_0^\infty t \lambda N dt}{N_0} = \lambda \int_0^\infty t e^{-\lambda t} dt = \frac{1}{\lambda}.$$

Таким образом, среднее время жизни радиоактивного ядра  $\tau = \frac{1}{\lambda}$  увеличивается при уменьшении вероятности распада ядра за единицу времени, которая определяется постоянной распада  $\lambda$ . Откуда период полураспада и среднее время жизни ядра связаны соотношением

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \approx 0,693 \cdot \tau.$$

Закон сложного радиоактивного распада.

Дочернее ядро, образующееся при распаде материнского ядра, также может быть нестабильным и испытывать радиоактивный распад. Пусть постоянная распада материнского ядра равна  $\lambda_1$ , а дочернего ядра  $\lambda_2$ . Найдем, как будут меняться с течением времени числа материнских  $N_1$  и дочерних  $N_2$  ядер. Изменения  $dN_1$  и  $dN_2$  со временем определяются следующими дифференциальными уравнениями:  $\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1$ ,  $\frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2$ .

Решение этой системы уравнений имеет вид:

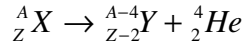
$$N_1 = N_{10} e^{-\lambda_1 t}, \quad N_2 = N_{10} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} e^{-\lambda_1 t} + \left( N_{20} - N_{10} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \right) e^{-\lambda_2 t}.$$

Здесь  $N_{10}$  и  $N_{20}$  — числа материнских и дочерних ядер соответственно в начальный момент времени. Если первоначально имелись только материнские ядра, т. е. если  $N_{20} = 0$ , то выражение упрощается:

$$N_2 = N_{10} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}).$$

Альфа-распад.

$\alpha$ -распад представляет собой процесс самопроизвольного испускания радиоактивным ядром  $\alpha$ -частиц (ядер гелия  ${}^4_2\text{He}$ ). Он происходит по схеме



где  $X$  и  $Y$  — химические символы распадающегося (материнского) и образующегося (дочернего) ядер соответственно. Массовое число дочернего ядра меньше массового числа материнского ядра на четыре единицы, а зарядовое — на две единицы.

В настоящее время известно более двухсот ядер, испытывающих  $\alpha$ -распад. Большинство из этих ядер получается искусственным путем.

При распаде  $\alpha$ -частицы вылетают из ядер с очень большими скоростями ( $v_\alpha \leq 0,1c$ ). Их кинетическая энергия  $E_\alpha$  равна нескольким МэВ. Двигаясь в среде,  $\alpha$ -частица теряет свою энергию на ионизацию молекул вещества. Пробег  $\alpha$ -частицы, т. е. расстояние, которое она проходит до полной остановки, зависит от плотности среды. Так, в воздухе при нормальном давлении ее пробег составляет несколько см, а в твердом теле — несколько мм.

Обычно при  $\alpha$ -распаде образуется несколько моноэнергетических групп  $\alpha$ -частиц, незначительно отличающихся по энергиям (так называемая тонкая структура  $\alpha$ -распада). Это объясняется тем, что дочернее ядро может образовываться не только в основном, но и в возбужденных состояниях.

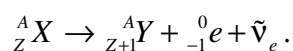
$\alpha$ -частица, покидая ядро, преодолевает потенциальный барьер, создаваемый силами ядерного притяжения и силами кулоновского отталкивания. Поскольку высота барьера заметно (в несколько раз) превышает энергию  $\alpha$ -частицы, то выход  $\alpha$ -частицы из ядра возможен только за счет туннельного эффекта.

*Замечание.* Радиоактивные ядра могут испускать и более крупные частицы, чем ядра гелия  $\text{He}$  ( $\alpha$ -частицы), например ядра углерода  $\text{C}$  или ядра неона  $\text{Ne}$ . Такие распады были экспериментально обнаружены в 80-х гг. В отличие от  $\alpha$ -радиоактивности эти распады получили название *кластерной радиоактивности*. Поскольку массы ядер углерода и неона заметно превышают массу  $\alpha$ -частицы, то вероятность таких распадов (вероятность туннелирования столь массивных частиц) очень невелика. Действительно, вероятность вылета ядра  $\text{C}$  примерно в  $10^{10}$  раз меньше вероятности вылета  $\alpha$ -частицы. Для ядра неона  $\text{Ne}$  это отношение достигает  $10^{12}$  раз. В дальнейшем было обнаружено самопроизвольное испускание тяжелыми ядрами ядер магния, кремния и серы.

Бета-распад.

$\beta$ -распадом называется самопроизвольное превращение радиоактивного ядра  ${}_Z^AX$  в ядро-изобар  ${}_{Z+1}^AY$  или  ${}_{Z-1}^AY$ . В этом процессе один из нейтронов ядра превращается в протон или один из протонов превращается в нейтрон. Таким образом,  $\beta$ -распад является не внутриядерным, а внутринуклонным процессом. Ответственным за  $\beta$ -распад является слабое взаимодействие нуклонов в ядре. Существует три вида  $\beta$ -распада: электронный ( $\beta^-$ -распад), позитронный ( $\beta^+$ -распад) и электронный захват.

1. *Электронный  $\beta$ -распад* ( $\beta^-$ -распад). В этом случае материнское ядро  ${}_Z^AX$  испускает электрон, поэтому зарядовое число дочернего ядра  ${}_{Z+1}^AY$  увеличивается на единицу. Электронный  $\beta^-$ -распад протекает по схеме



При этом наряду с дочерним ядром образуется электрон  ${}_{-1}^0e$  и *электронное антинейтрино*  $\bar{\nu}_e$ . Здесь электрону присвоено зарядовое число  $Z = -1$  и массовое число  $A = 0$ , чтобы подчеркнуть сохранение электрического заряда и числа нуклонов в процессе распада. В основе электронного  $\beta$ -распада лежит превращение в ядре нейтрона в протон:

$$n \rightarrow p + e^{-} + \bar{\nu}_e.$$

Поэтому можно определить  $\beta^{-}$  - распад как процесс самопроизвольного превращения нейтрона в протон внутри атомного ядра.

Как показывают экспериментальные исследования, электроны, образующиеся при  $\beta^{-}$  - распаде, имеют широкий энергетический спектр от нуля до некоторого максимального значения. Первоначально, до открытия нейтрино, казалось, что  $\beta^{-}$  - распад протекает с нарушением закона сохранения энергии. Паули в 1932 г. выдвинул гипотезу, согласно которой при  $\beta^{-}$  - распаде испускается еще одна частица, которая уносит часть энергии. Так как эта частица никак себя не проявляла, то следовало предположить, что она электронейтральна и обладает очень малой массой. Эта частица, названная Э. Ферми *нейтрино*, что дословно означает «маленький нейтрон», была экспериментально обнаружена лишь в 1956 г.

Установлено, что существует несколько типов нейтрино: электронное, мюонное, тау-лептонное и их античастицы. Тип нейтрино определяется заряженной частицей, вместе с которой нейтрино рождается и с которой взаимодействует.  $\beta^{-}$  - распад сопровождается испусканием электронного антинейтрино.

2. *Позитронный  $\beta$ -распад* ( $\beta^{+}$ -распад). В случае позитронного  $\beta^{+}$ -распада ядро испускает позитрон, в результате чего его зарядовое число  $Z$  уменьшается на единицу. Позитронный  $\beta^{+}$ -распад осуществляется по схеме

$${}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + {}^0_1 e^{+} + \nu_e.$$

Позитронный  $\beta^{+}$ -распад сопровождается испусканием позитрона  $e^{+}$  и нейтрино  $\nu_e$ , т. е. тех частиц, которые представляют собой античастицы по отношению к частицам, испускаемым при электронном  $\beta^{-}$ -распаде. В основе  $\beta^{+}$ -распада лежит превращение в ядре протона в нейтрон:

$$p \rightarrow n + e^{+} + \nu_e.$$

Поскольку масса протона меньше массы нейтрона, то для свободного протона такой процесс невозможен по энергетическим соображениям. Однако протон, находящийся в ядре, может получать необходимую энергию от других нуклонов ядра.

3. *Электронный захват*. Третий вид  $\beta$ -распада - электронный захват - представляет собой поглощение ядром одного из электронов электронной оболочки своего атома. Чаще всего поглощается электрон из  $K$ -оболочки, поэтому электронный захват называют еще  $K$ -захватом. Реже поглощаются электроны из  $L$ - или  $M$ -оболочек. В результате  $K$ -захвата происходит превращение одного из протонов ядра в нейтрон, сопровождающееся испусканием нейтрино:

$$p + e^{-} \rightarrow n + \nu_e.$$

Схема  $K$ -захвата имеет следующий вид:

$${}^A_Z X + {}^0_{-1} e \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + \nu_e.$$

На освободившееся в результате  $K$ -захвата место в электронной оболочке атома могут переходить электроны из вышележащих слоев, в результате чего возникает рентгеновское излучение.

Подводя итог описанию  $\alpha$ - и  $\beta$ -распадов, следует отметить, что  $\alpha$ -распад наблюдается только у тяжелых ядер и некоторых ядер редкоземельных элементов. Напротив,  $\beta$ -активные ядра более многочисленны. Практически для каждого атомного номера  $Z$  существуют нестабильные изотопы, обладающие  $\beta$ -активностью.

#### Спонтанное деление тяжелых ядер.

Самопроизвольное деление тяжелых ядер было впервые обнаружено советскими физиками Г.Н. Флеровым и К.А. Петряком в 1940 г. у ядер урана.

Спонтанное деление, так же как и  $\alpha$ -распад, происходит за счет туннельного эффекта. Как и при всяком туннельном эффекте, вероятность спонтанного деления очень сильно зависит от высоты барьера деления  $\Delta U$ . Для изотопов урана и соседних с ним элементов высота барьера деления составляет  $\Delta U \sim 6$  МэВ.

Спонтанное деление является основным каналом распада сверхтяжелых ядер. Осколки деления ядер урана U и плутония Pu асимметричны по массе. С ростом массового числа распадающегося ядра осколки деления становятся более симметричными.

#### Протонная радиоактивность.

При протонной радиоактивности ядро испытывает превращения, испуская при этом один или два протона. Протонная радиоактивность впервые была обнаружена в 1963 г. группой советских физиков под руководством Н. Флерова.

Протонная радиоактивность возможна лишь у небольшого числа искусственно получаемых легких ядер, которые характеризуются относительно короткими временами жизни и большим избытком протонов. Однако при проведении эксперимента протонную радиоактивность очень трудно обнаружить из-за сильного фона конкурирующих  $\alpha$ - и  $\beta^+$ -распадов, приводящих к образованию изотопов таких же химических элементов.

#### Радиоактивные ряды.

Ядра, возникающие в результате радиоактивных превращений, могут сами оказаться радиоактивными. Они распадаются со скоростью, которая характеризуется их постоянной распада. Новые продукты распада, в свою очередь, могут быть радиоактивными и т. д. В итоге возникает целый ряд радиоактивных превращений.

Все  $\alpha$ - и  $\beta$ -радиоактивные элементы можно объединить в четыре *радиоактивных ряда*, или *радиоактивных семейства*. Каждый из членов такого ряда получается из предыдущего элемента за счет  $\alpha$ - или  $\beta$ -распадов. Каждый ряд имеет своего родоначальника - ядро с наибольшим периодом полураспада. Внутри ряда массовые числа ядер  $A$  могут либо быть одинаковыми (при  $\beta$ -распаде), либо отличаться на число, кратное четырем (при  $\alpha$ -распаде).

Если для всех членов ряда  $A = 4n + C$ , где  $n$  - целое число, то этот ряд называется рядом  $(4n + C)$ . Выделяют три естественных радиоактивных ряда и один искусственный.

Естественные ряды: ряд тория ( $4n$ ) - начинается с нуклида уран  ${}^{238}_{92}\text{U}$ ; ряд радия ( $4n + 2$ ) - начинается с  ${}^{238}_{92}\text{U}$ ; ряд актиния ( $4n + 3$ ) - начинается с  ${}^{235}_{92}\text{U}$ . Все они заканчиваются различными стабильными изотопами свинца  ${}^{208}_{82}\text{Pb}$ ,  ${}^{206}_{82}\text{Pb}$ ,  ${}^{207}_{82}\text{Pb}$  соответственно.

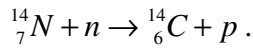
Искусственный ряд - ряд нептуния ( $4n + 1$ ) - начинается с  ${}^{237}_{93}\text{Np}$  и заканчивается висмутом  ${}^{209}_{83}\text{Bi}$ .

#### Радиоизотопный метод датировки

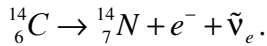
Для установки возраста археологических находок, растительных и животных ископаемых остатков и минералов широко используется *радиоизотопный анализ*. Он основан на постоянной доле скорости распада слаборадиоактивных изотопов, независимой от температуры, давления и химических реакций.

В определении возраста горных пород используются в основном радиоактивные ряды, начинающиеся с изотопов урана  ${}^{238}\text{U}$  - наиболее стабильного изотопа урана с периодом полураспада  $4,51 \cdot 10^9$  лет,  ${}^{235}\text{U}$  с периодом  $7,13 \cdot 10^5$  лет и изотопа тория  ${}^{232}\text{Th}$  с периодом  $1,41 \cdot 10^{10}$  лет и заканчивающиеся различными изотопами свинца. В расплаве исходной горной породы до застывания уран и свинец разделены вследствие различия массы. После застывания горной породы продукты распада урана оказываются перемешанными вместе с остатками урана. По количественному соотношению изотопов урана и свинца можно относительно точно установить время, прошедшее с момента застывания породы.

Для определения возраста растительных и животных останков и археологических находок в основном используется более короткопериодный метод - *радиоуглеродный анализ*. Он основывается на определении соотношения радиоактивного изотопа углерода  ${}^{14}\text{C}$ , который образуется в верхних слоях атмосферы из изотопа азота  ${}^{14}\text{N}$  под воздействием нейтронов космических лучей



Радиоизотоп углерода  ${}^{14}\text{C}$  подвержен  $\beta^-$ -распаду с периодом полураспада  $T_{1/2} = 5730 \pm 40$  лет



Соотношение радиоактивного  ${}^{14}\text{C}$  и стабильных изотопов углерода  ${}^{12}\text{C}$  в атмосфере и в биосфере примерно одинаково из-за активного перемешивания атмосферы, поскольку все живые организмы постоянно участвуют в углеродном обмене, получая углерод из окружающей среды, а изотопы, в силу их химической неразличимости, участвуют в биохимических процессах практически одинаковым образом. При радиоуглеродном анализе возраст определяется по удельной остаточной активности радиоактивного изотопа.

#### Гамма-излучение ядер.

Это излучение представляет собой коротковолновое электромагнитное излучение, испускаемое ядрами при переходе из возбужденного состояния в состояние с меньшей энергией. Поскольку ядро является квантовой системой с дискретным набором энергетических уровней, то и спектр  $\gamma$ -излучения также дискретен.

Энергия  $\gamma$ -квантов  $E_\gamma$ , испускаемых различными ядрами, лежит в диапазоне

$$10 \text{ кэВ} < E_\gamma < 5 \text{ МэВ}.$$

Соответствующая длина волны  $\gamma$ -излучения составляет  $2 \cdot 10^{-13} \text{ м} < \lambda < 10^{-10} \text{ м}$ .

*Замечание.* Изолированный свободный нуклон не может испустить или поглотить  $\gamma$ -квант, так как при этом были бы нарушены законы сохранения энергии и импульса. Это означает, что при испускании  $\gamma$ -излучения ядром  $\gamma$ -квант обменивается импульсом не с одним, а с несколькими нуклонами. Таким образом, испускание  $\gamma$ -излучения является внутриядерным процессом.

$\gamma$ -излучение сопровождает  $\alpha$ - и  $\beta$ -распады ядер. Это происходит в тех случаях, когда распад с переходом материнского ядра в основное состояние дочернего ядра либо маловероятен, либо запрещен правилами отбора. Среднее время жизни ядра в возбужденном состоянии различно для разных ядер и обычно находится в пределах  $10^{-15} \text{ с} < \tau < 10^{-7} \text{ с}$ . За это время ядро переходит на более низкий энергетический уровень, испуская при этом  $\gamma$ -излучение.

Возможен и другой канал перехода ядра в состояние с меньшей энергией - передача избытка энергии непосредственно одному из атомных электронов. Такой процесс называется *внутренней конверсией электронов*, а сами электроны - электронами внутренней конверсии (*конверсионными электронами*).

Конверсионный электрон (обычно это электрон  $K$ - или  $L$ -оболочки), получив энергию от ядра, вырывается из атома, поскольку энергия, передаваемая ему ядром, как правило, заметно превышает энергию связи электронов в атоме. На освободившееся место переходит один из электронов с вышележащих оболочек. Такой процесс сопровождается испусканием рентгеновского излучения.

#### Эффект Мессбауэра.

Явление резонансного испускания и поглощения  $\gamma$ -квантов ядрами атомов кристалла называется *эффектом Мессбауэра*.

Пусть покоящееся свободное ядро, переходя из возбужденного состояния в основное, испускает  $\gamma$ -квант с энергией  $E_\gamma$  и импульсом  $\vec{p}_\gamma$ . В результате ядро приобретает импульс отдачи  $\vec{p}_я$  и кинетическую энергию (энергию отдачи)  $W_я$ . Если разность энергий основного и возбужденного состояний ядра равна  $\Delta E$ , то из законов сохранения энергии и импульса следует:

$$\Delta E = E_\gamma + W_я, \quad \vec{p}_\gamma + \vec{p}_я = \vec{0}.$$

Откуда энергия отдачи  $W_я$ , которая передается ядру при испускании  $\gamma$ -кванта, равна

$$W_я = \frac{p_я^2}{2M_я} = \frac{p_\gamma^2}{2M_я}$$

где  $M_{\text{я}}$  - масса ядра. Так как  $p_{\gamma} = \frac{E_{\gamma}}{c}$ , то  $W_{\text{я}} = \frac{E_{\gamma}^2}{2M_{\text{я}}c^2}$ .

При этом большую часть энергии, выделяемой ядром при испускании  $\gamma$ -излучения, уносит  $\gamma$ -квант. Действительно,

$$\frac{E_{\gamma}}{W_{\gamma}} = \frac{E_{\gamma}}{E_{\gamma}^2} 2M_{\text{я}}c^2 = \frac{2M_{\text{я}}c^2}{E_{\gamma}} \gg 1$$

поскольку энергия покоя ядра  $M_{\text{я}}c^2$  значительно превышает энергию  $\gamma$ -кванта  $E_{\gamma}$ . Поэтому в выражении можно заменить  $E_{\gamma}$  на  $\Delta E$ .

$$W_{\text{я}} = \frac{(\Delta E)^2}{2M_{\text{я}}c^2}$$

Именно это выражение и определяет энергию отдачи ядра при испускании  $\gamma$ -кванта.

Ядро, поглощая  $\gamma$ -квант, получает импульс отдачи и энергию отдачи  $W_{\text{я}}$ . Чтобы сообщить ядру энергию  $\Delta E$ , необходимую для перевода его из основного состояния в возбужденное, энергия налетающего  $\gamma$ -кванта  $E'_{\gamma}$  должна превысить энергию перехода  $\Delta E$  на  $W_{\text{я}}$ , т. е.

$$E'_{\gamma} = \Delta E + W_{\text{я}}.$$

Таким образом, линии испускания и поглощения  $\gamma$ -квантов ядрами должны быть сдвинуты относительно друг друга по шкале энергии на величину

$$\delta E = E'_{\gamma} - E_{\gamma} = 2W_{\text{я}}.$$

Поскольку  $\gamma$ -излучение, испускаемое ядрами, имеет энергетическую линию конечной ширины  $\Gamma$ , то, для того чтобы можно было наблюдать в эксперименте *резонансное поглощение*  $\gamma$ -квантов, т. е. поглощение ядром  $\gamma$ -излучения, энергия которого точно равна энергии перехода  $\Delta E$ , необходимо, чтобы линии испускания и поглощения перекрывались. Это означает, что должно выполняться соотношение

$$\Gamma \geq W_{\text{я}}.$$

В случае изолированного ядра ширина  $\Gamma$  линии излучения является *естественной шириной*, задаваемой соотношением неопределенностей  $\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$ , где  $\tau$  — время жизни ядра в возбужденном состоянии.

Оценки ширины линии излучения, испускаемого ядром, и энергии отдачи  $W_{\text{я}}$  при испускании  $\gamma$ -квантов ядром показывают, что резонансное поглощение  $\gamma$ -квантов изолированными ядрами свободных атомов невозможно, т.к.  $\Gamma \ll W_{\text{я}}$ .

Совсем иначе обстоит дело, если ядро принадлежит атому, находящемуся в узле кристаллической решетки. В этом случае существует вероятность того, что импульс отдачи будет передан не испускающему  $\gamma$ -квант ядру, а всему кристаллу в целом. При этом энергию отдачи

также можно определить из выражения  $W_{\text{я}} = \frac{E_{\gamma}^2}{2M_{\text{я}}c^2}$ , в котором массу ядра  $M_{\text{я}}$  нужно заменить

на массу всего кристалла  $W_{\text{я}} = \frac{E_{\gamma}^2}{2Mc^2}$ . Поскольку масса кристалла неизмеримо больше массы ядра, то энергия отдачи, передаваемая излучающим ядром кристаллу, ничтожно мала по сравнению с естественной шириной линии  $\Gamma \gg W_{\text{я}}$ .

Таким образом, ядра, находящиеся в кристалле, могут испускать  $\gamma$ -кванты с энергией, практически точно равной энергии ядерного перехода  $E_{\gamma} = E_0$ , и с естественной шириной линии  $\Gamma$ . Эти  $\gamma$ -кванты могут поглощаться *такими же ядрами*, находящимися в другом кристалле, причем импульс отдачи с определенной вероятностью также может быть передан не поглощающему ядру, а всему кристаллу. В таком процессе ядро поглощает энергию, точно равную энергии возбуждения (разности значений энергий основного и возбужденного состояний ядра)

$\Delta E$ . Это означает, что если ядра находятся в кристалле, т. е. в *связанном состоянии*, то для них становится возможным резонансное испускание и поглощение  $\gamma$ -излучения. В этом и состоит суть эффекта, открытого в 1958 г. немецким физиком Р. Мессбауэром и названного его именем.

Рудольф Людвиг Мёссбауэр (*Rudolf Ludwig Mößbauer*, рожд. 1929) — немецкий физик, специалист в физике атомного ядра и элементарных частиц, лауреат Нобелевской премии по физике за 1961 год.

Ядра, для которых наблюдается эффект Мессбауэра, называются *мессбауэровскими ядрами*, а резонансное  $\gamma$ -излучение, испускаемое такими ядрами — мессбауэровским  $\gamma$ -излучением.

В случае мессбауэровского  $\gamma$ -излучения отсутствует доплеровское уширение линии, связанное с тепловыми колебаниями атомов в узлах кристаллической решетки. Т.к. период тепловых колебаний атомов составляет  $T \sim 10^{-12} \dots 10^{-13}$  с, то время жизни мессбауэровского ядра в возбужденном состоянии  $\tau$  оказывается намного больше ( $\tau \sim 10^{-7} \dots 10^{-9}$  с). Находясь в возбужденном состоянии, ядро успевает много раз изменить направление своей скорости, так что ее среднее значение практически равно нулю.

У мессбауэровской линии поглощения чрезвычайно малая ширина  $\Delta E$ . Как следует из результатов эксперимента, чтобы нарушить ядерный  $\gamma$ -резонанс за счет эффекта Доплера, оказывается достаточно двигать источник относительно поглотителя со скоростью всего лишь около 1 мм/с.

Таким образом, благодаря эффекту Мессбауэра, исследователи получили метод с уникальным энергетическим разрешением

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Gamma}{E_0}.$$

Для наиболее широко используемого на практике мессбауэровского изотопа  $^{57}\text{Fe}$  это разрешение составляет  $10^{-13}$ , а для изотопа  $^{67}\text{Zn}$  оно достигает  $5 \cdot 10^{-16}$ . Значение открытия Мессбауэра было столь велико, что уже через три года (в 1961 г.) Р. Мессбауэр был удостоен Нобелевской премии по физике.

В настоящее время эффект Мессбауэра находит очень широкое и разнообразное практическое применение. Он используется в физике твердого тела, ядерной физике, химии, биологии, геологии, медицине, археологии, многочисленных технических приложениях.

С помощью эффекта Мессбауэра был выполнен ряд уникальных экспериментов, в том числе таких, осуществление которых до его открытия считалось невозможным. В первую очередь это относится к наблюдению предсказанного теорией относительности гравитационного красного смещения — изменения частоты фотона в гравитационном поле Земли. Исследователи назвали этот эксперимент опытом по измерению «кажущегося веса фотона». Расчеты показывают, что относительное изменение частоты фотона при его подъеме на высоту  $h = 20$  м со-

ставляет  $\frac{\Delta \omega}{\omega} = 2 \cdot 10^{-15}$ . Это ничтожно малое смещение частоты было обнаружено в эксперимен-

те, проведенном Р. Паундом и Г. Ребкой с помощью эффекта Мессбауэра в 1959 г. Данные измерений составили  $0,99 \pm 0,05$  от значения, предсказанного теорией.



*Лекция 25. Элементарные частицы.*

*Основные характеристики. Типы взаимодействий. Классификация частиц. Лептоны и адроны. Кварковая структура адронов. Симметрия и законы сохранения в мире элементарных частиц.*

Элементарная частица - собирательный термин, относящийся к микрообъектам в субъядерном масштабе, которые невозможно расщепить на составные части. В современной физике термин «элементарные частицы» используют в более широком смысле: так называют мельчайшие частицы материи, подчиненные условию, что они не являются атомными ядрами и атомами (исключение составляет протон); иногда по этой причине элементарные частицы называют *субъядерными* частицами. Некоторые элементарные частицы (электрон, фотон, кварки и т. д.) на данный момент считаются бесструктурными и рассматриваются как первичные фундаментальные частицы. Другие элементарные частицы (так называемые составные частицы - протон, нейтрон и т.д.) имеют сложную внутреннюю структуру, но, тем не менее, по современным представлениям, разделить их на части невозможно. Строение и поведение элементарных частиц изучается физикой элементарных частиц.

Наиболее важное квантовое свойство всех элементарных частиц - их способность рождаться и уничтожаться (испускаться и поглощаться) при взаимодействии с др. частицами. В этом отношении они полностью аналогичны фотонам. Элементарные частицы — это специфические кванты материи, более точно - кванты соответствующих физических полей. Все процессы с элементарными частицами протекают через последовательность актов их поглощения и испускания.

Распад нестабильных элементарных частиц на более лёгкие частицы, сопровождаемый выделением энергии, отвечает той же закономерности и является процессом, в котором продукты распада рождаются в момент самого распада и до этого момента не существуют. В этом отношении распад элементарных частиц подобен переходу возбуждённого атома в основное состояние с испусканием фотона.

На сегодня достоверно известно существование четырех фундаментальных взаимодействий: гравитационного, электромагнитного, сильного, слабого. При этом электромагнитное и слабое взаимодействия являются проявлениями единого *электрослабого* взаимодействия.

Различные процессы с элементарными частицами заметно отличаются по интенсивности протекания. В соответствии с этим взаимодействия элементарных частиц можно феноменологически разделить на несколько классов: сильные, электромагнитные и слабые взаимодействия. Все элементарные частицы обладают, кроме того, гравитационным взаимодействием.

*Сильные взаимодействия* выделяются как взаимодействия, которые порождают процессы, протекающие с наибольшей интенсивностью среди всех остальных процессов. Они приводят и к самой сильной связи элементарных частиц. Именно сильные взаимодействия обуславливают связь протонов и нейтронов в ядрах атомов и обеспечивают исключительную прочность этих образований, лежащую в основе стабильности вещества в земных условиях

*Электромагнитные взаимодействия* характеризуются как взаимодействия, в основе которых лежит связь с электромагнитным полем. Процессы, обусловленные ими, менее интенсивны, чем процессы сильных взаимодействий, а порождаемая ими связь элементарных частиц заметно слабее. Электромагнитные взаимодействия, в частности, ответственны за связь атомных электронов с ядрами и связь атомов в молекулах.

*Слабые взаимодействия*, как показывает само название, вызывают очень медленно протекающие процессы с элементарными частицами. Иллюстрацией их малой интенсивности может служить тот факт, что нейтрино, обладающие только слабыми взаимодействиями, беспрепятственно пронизывают, например, толщу Земли и Солнца. Слабые взаимодействия обуславливают также медленные распады так называемых квазистабильных элементарных частиц. Времена жизни этих частиц лежат в диапазоне  $10^{-8}$ - $10^{-10}$  сек, тогда как типичные времена для сильных взаимодействий элементарных частиц составляют  $10^{-23}$ - $10^{-24}$  сек.

*Гравитационные взаимодействия*, хорошо известные по своим макроскопическим проявлениям, в случае элементарных частиц на характерных расстояниях  $\sim 10^{-13}$  см дают чрезвычайно малые эффекты из-за малости масс элементарных частиц.

Ведутся поиски других типов фундаментальных взаимодействий, как в явлениях микромира, так и в космических масштабах, однако пока существование какого-либо другого типа фундаментального взаимодействия не обнаружено.

Классификация элементарных частиц.

По величине спина все элементарные частицы делятся на два класса: фермионы - частицы с полуцелым спином (например, электрон, протон, нейтрон, нейтрино); бозоны - частицы с целым спином (например, фотон, глюон, мезоны).

По видам взаимодействий элементарные частицы делятся на основные группы.

*Первую* составляют переносчики взаимодействий - *калибровочные бозоны* - частицы, посредством обмена которыми осуществляются взаимодействия. Сюда относится фотон, или квант электромагнитного излучения, - частица, переносящая электромагнитное взаимодействие. Переносчики электрослабого взаимодействия три промежуточных векторных бозона  $W^+$ ,  $W^-$  и  $Z^0$ , а также восемь глюонов - частиц, переносящих сильное взаимодействие. Сюда также следовало бы отнести *гравитон* - гипотетическую частицу, переносящую гравитационное взаимодействие. Однако существование гравитонов пока не доказано экспериментально.

*Вторая* группа элементарных частиц - лептоны (др.-греч.  $\lambda\epsilon\pi\tau\omicron\zeta$  - лёгкий), участвующие только в электромагнитных и слабых взаимодействиях. Известно 6 лептонов: электрон, электронное нейтрино, мюон, мюонное нейтрино, тяжелый  $\tau$ -лептон (тау-лептон) и соответствующее  $\tau$ -нейтрино.

Электрон считается материальным носителем наименьшей массы в природе  $m_e$ , равной  $9,1 \cdot 10^{-31}$  кг (в энергетических единицах  $\approx 0,511$  МэВ) и наименьшего отрицательного электрического заряда  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл. Мюоны ( $\mu^-$ ) - частицы с массой около 207 масс электрона (105,7 МэВ) и отрицательным электрическим зарядом, равным заряду электрона; тяжелый  $\tau$ -лептон имеет массу около 1,8 ГэВ. Соответствующие этим частицам три типа нейтрино - электронное ( $\nu_e$ ), мюонное ( $\nu_\mu$ ) и  $\tau$ -нейтрино ( $\nu_\tau$ ) - легкие электрически нейтральные частицы. Все лептоны имеют спин  $\frac{1}{2}\hbar$ , т.е. являются *фермионами*.

Каждому из лептонов соответствует античастица, имеющая те же значения массы, спина и других характеристик, но отличающаяся знаком электрического заряда. Существуют позитрон ( $e^+$ ) - античастица по отношению к электрону, положительно заряженный мюон ( $\mu^+$ ) и три типа антинейтрино ( $\bar{\nu}_e$ ,  $\bar{\nu}_\mu$ ,  $\bar{\nu}_\tau$ ), которым приписывают противоположный знак особого квантового числа, называемого *лептонным зарядом*.

*Третья группа* элементарных частиц - *адроны*, они участвуют в сильном, слабом и электромагнитном взаимодействиях. Адроны и лептоны образуют вещество.

Адроны представляют собой «тяжелые» частицы с массой, значительно превышающей массу электрона. Это наиболее многочисленная группа элементарных частиц. Адроны делятся на *барионы* - частицы со спином  $\frac{1}{2}\hbar$ , *мезоны* - частицы с целочисленным спином (0 или 1); а также так называемые *резонансы* - короткоживущие возбужденные состояния адронов.

К *барионам* (от греч.  $\beta\alpha\rho\upsilon\varsigma$  - тяжёлый) относят протон и нейтрон. Из протонов и нейтронов построены все атомные ядра, именно сильное взаимодействие обуславливает связь этих частиц между собой. В сильном взаимодействии протон и нейтрон имеют одинаковые свойства и рассматриваются как два квантовых состояния одной частицы - нуклона с *изотопическим спином*  $\frac{1}{2}\hbar$ . Барионы включают и *гипероны* - элементарные частицы с массой больше нуклонной:  $\Lambda$ -гиперон имеет массу 1116 МэВ,  $\Sigma$ -гиперон - 1190 МэВ,  $\Theta$ -гиперон - 1320 МэВ,  $\Omega$ -гиперон - 1670 МэВ.

*Мезоны* (от др. греч.  $\mu\acute{\epsilon}\sigma\omicron\varsigma$  - средний) имеют массы, промежуточные между массами протона и электрона ( $\pi$ -мезон,  $K$ -мезон). Существуют мезоны нейтральные и заряженные (с положительным и отрицательным элементарным электрическим зарядом). Все мезоны по своим статистическим свойствам относятся к бозонам.

*Резонансы* (резонансные частицы) - короткоживущие возбуждённые состояния сильно взаимодействующих адронов. В отличие от др. нестабильных частиц, резонансы распадаются в основном за счёт сильных взаимодействий. Поэтому их времена жизни лежат в интервале  $10^{-22} \div 10^{-24}$  сек, что по порядку величины совпадает с характерным ядерным временем.

Кроме того, в так называемой *Стандартной модели* с необходимостью присутствует *хиггсовский бозон*, который, впрочем, пока ещё не обнаружен экспериментально.

#### Основные свойства элементарных частиц

Каждая элементарная частица описывается набором дискретных значений физических величин (квантовых чисел). Общие характеристики всех элементарных частиц - масса, время жизни, спин, электрический заряд.

В зависимости от времени жизни элементарные частицы делятся на стабильные, квазистабильные и нестабильные (резонансы).

*Стабильными* (в пределах точности современных измерений) являются: электрон (время жизни более  $5 \cdot 10^{21}$  лет), протон (более  $10^{31}$  лет), фотон и нейтрино.

К *квазистабильным* относятся частицы, распадающиеся вследствие электромагнитного и слабого взаимодействий, их времена жизни более  $10^{-20}$  с.

*Резонансы* распадаются за счет сильного взаимодействия, их характерные времена жизни имеют порядок характерного ядерного времени  $10^{-22} - 10^{-24}$  с. В некоторых случаях распад тяжёлых резонансов (с массой  $> 3 \text{ ГэВ}$ ) за счёт сильных взаимодействий оказывается подавленным и время жизни увеличивается до значений  $\sim 10^{-20}$  сек

*Внутренними* характеристиками (квантовыми числами) элементарных частиц являются лептонный (символ  $L$ ) и барионный (символ  $B$ ) заряды; эти числа считаются строго *сохраняющимися величинами* для всех типов фундаментальных взаимодействий.

Лептоны несут специфический *лептонный заряд*  $L = +1$ , для лептонных нейтрино и их античастиц  $L$  имеют противоположные знаки  $L = -1$ .

Кроме того, в физике элементарных частиц для лептонов (и кварков) вводится понятие «поколение» как часть классификации элементарных частиц. В каждом поколении два лептона (и два кварка). Два лептона - это один лептон с электрическим зарядом  $-1$  (подобный электрону) и один нейтральный (нейтрино).

Существует три поколения лептонов:

- первое поколение: электрон, электронное нейтрино;
- второе поколение: мюон, мюонное нейтрино;
- третье поколение: тау-лептон, тау-нейтрино.

Каждый член следующего поколения имеет массу большую, чем соответствующая частица предыдущего. Все обычные атомы содержат частицы первого поколения. Второе и третье поколения заряженных частиц не присутствуют в обычной материи и наблюдаются только в условиях очень высоких энергий. Нейтрино всех поколений пронизывают вселенную, но редко взаимодействуют с обычной материей.

Для адронов  $L = 0$ , и это ещё одно проявление их отличия от лептонов. В свою очередь, значительные части адронов следует приписать особый *барионный заряд*  $B$ .

Адроны с  $B = +1$  образуют подгруппу *барионов*, для соответствующих античастиц  $B = -1$ . Адроны с  $B = 0$  образуют подгруппу мезонов.

Для лептонов  $B = 0$ . Для фотона  $B = 0$  и  $L = 0$ .

Для адронов характерно наличие особых квантовых чисел: «странности», «очарования», «красоты». Обычные (нестранные) адроны - протон, нейтрон,  $\pi$ -мезоны. Барионы и мезоны подразделяются на совокупности: обычных (нестранных) частиц (протон, нейтрон,  $\pi$ -мезоны), странных частиц (гипероны,  $K$ -мезоны) и очарованных частиц. Этому разделению отвечает наличие у адронов особых квантовых чисел: странности  $S$  и очарования (английское charm)  $Ch$  с допустимыми значениями:  $S = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$  и  $Ch = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ . Для обычных частиц  $S = 0$  и  $Ch$

$= 0$ , для странных частиц  $S \neq 0$ ,  $Ch = 0$ , для очарованных частиц  $Ch \neq 0$ . Вместо странности часто используется квантовое число *гиперзаряд*  $Y = S + B$ .

Уже первые исследования с обычными адронами выявили наличие среди них семейств частиц, близких по массе, с очень сходными свойствами по отношению к сильным взаимодействиям, но с различными значениями электрического заряда. Протон и нейтрон (нуклоны) были первым примером такого семейства. Позднее аналогичные семейства были обнаружены среди странных и среди очарованных адронов. Общность свойств частиц, входящих в такие семейства, является отражением существования у них одинакового значения специального квантового числа - *изотопического спина*  $I$ , принимающего, как и обычный спин, целые и полуцелые значения. Сами семейства обычно называются *изотопическими мультиплетами*. Число частиц в мультиплете  $N$  связано с  $I$  соотношением:  $N = 2I + 1$ . Частицы одного изотопического мультиплета отличаются друг от друга значением «проекции» изотопического спина  $I_z$ . С точки зрения теории изоспина, нейтрон и протон являются одной и той же частицей – нуклоном с *изоспином*  $I=1/2$  – в двух разных состояниях, различающихся *проекцией вектора изоспина* на выделенную ось  $I_z$  в *пространстве изоспина*. Таких проекций для момента  $I=1/2$  может быть только две:  $I_z=+1/2$  (протон) и  $I_z = -1/2$  (нейтрон).

Важной характеристикой адронов является также *внутренняя чётность*  $P$ , связанная с операцией пространственной инверсии (заменой пространственных направлений на обратные). Величина  $P$  принимает значения  $\pm 1$ .

Для всех элементарных частиц с ненулевыми значениями хотя бы одного из зарядов  $Q$ ,  $L$ ,  $B$ ,  $Y$ ,  $S$  и очарования  $Ch$  существуют античастицы с теми же значениями массы  $m$ , времени жизни  $t$ , спина  $J$  и для адронов изотопического спина  $I$ , но с противоположными знаками всех зарядов и для барионов с противоположным знаком внутренней чётности  $P$ .

Частицы, не имеющие античастиц, называются абсолютно (истинно) нейтральными. Абсолютно нейтральные адроны обладают специальным квантовым числом - зарядовой чётностью (т. е. чётностью по отношению к операции *зарядового сопряжения*)  $C$  со значениями  $\pm 1$ ; примерами таких частиц могут служить фотон и  $\pi^0$ .

Важное свойство элементарных частиц – их способность к взаимопревращениям в результате электромагнитных или других взаимодействий. Один из видов взаимопревращений – так называемое *рождение пары*, или образование одновременно частицы и античастицы (в общем случае - образование пары элементарных частиц с противоположными лептонными или барионными зарядами). Возможны процессы рождения электрон-позитронных пар  $e^-e^+$ , мюонных пар  $\mu^+\mu^-$  новых тяжелых частиц при столкновениях лептонов, образование из кварков  $ss$ - и  $bb$ -состояний. Другой вид взаимопревращений элементарных частиц - аннигиляция пары при столкновениях частиц с образованием конечного числа фотонов ( $\gamma$ -квантов). Обычно образуются 2 фотона при нулевом суммарном спине сталкивающихся частиц и 3 фотона - при суммарном спине, равном 1 (проявление закона сохранения зарядовой четности).

При определенных условиях, в частности при невысокой скорости сталкивающихся частиц, возможно образование связанной системы - позитрония  $e^-e^+$  и мюония  $\mu^+e^-$ . Эти нестабильные системы, часто называемые водородоподобными атомами. Их время жизни в веществе в большой степени зависит от свойств вещества, что позволяет использовать водородоподобные атомы для изучения структуры конденсированного вещества и кинетики быстрых химических реакций.

#### Кварковая модель адронов

Детальное рассмотрение квантовых чисел адронов с целью их классификации позволило сделать вывод о существовании особых структурных единиц, из которых построены адроны, – *кварков*.

Гипотеза о том, что адроны построены из специфических субъединиц, была впервые выдвинута М.Гелл-Манном и, независимо от него, Дж. Цвейгом в 1964 году. Слово «кварк» было заимствовано Гелл-Манном из романа Дж. Джойса «Поминки по Финнегану», где в одном из

эпизодов звучит фраза «Three quarks for Muster Mark!» (обычно переводится как «Три кварка для Мастера Марка!»).

В настоящее время известно 6 типов кварков. Спин всех кварков  $\frac{1}{2}$  (фермионы). Барионный заряд  $\frac{1}{3}$ . Кварки естественным образом группируются в три поколения. В каждом поколении один кварк обладает электрическим зарядом  $+\frac{2}{3}$ , а другой  $-\frac{1}{3}$ .

Символ	Название		Электрический заряд (в долях $e$ )	Масса
	русское	английское		
Первое поколение				
$d$	нижний	$down$	$-\frac{1}{3}$	$\sim 5 \text{ МэВ}/c^2$
$u$	верхний	$up$	$+\frac{2}{3}$	$\sim 3 \text{ МэВ}/c^2$
Второе поколение				
$s$	странный	$strange$	$-\frac{1}{3}$	$95 \pm 25 \text{ МэВ}/c^2$
$c$	очарованный	$charm (charmed)$	$+\frac{2}{3}$	$1,8 \text{ ГэВ}/c^2$
Третье поколение				
$b$	прелестный	$beauty (bottom)$	$-\frac{1}{3}$	$4,5 \text{ ГэВ}/c^2$
$t$	истинный	$truth (top)$	$+\frac{2}{3}$	$171 \text{ ГэВ}/c^2$

Каждому кварку приписываются определённые квантовые числа, называемые *ароматами*. Так кварк  $s$  имеет ненулевое квантовое число странности  $S=1$ , кварк  $c$  - ненулевое число шарма  $Ch=1$ , кварк  $b$  - квантовое число прелести (красоты)  $b=1$ , кварк  $t$  - квантовое число истинности (правды)  $T=1$ . Кваркам  $d$  и  $u$  приписывается аромат - проекция *изоспина*. Для  $d$  эта проекция равна  $I_z=-1/2$ , а для  $u$   $I_z=+1/2$  соответственно.

Каждому кварку соответствует *антикварк* с противоположными квантовыми числами.

Кроме того постулируется, что кварки обладают и дополнительной внутренней характеристикой, задаваемой квантовым числом «цвет». Цвет кварка может принимать три значения: жёлтый, красный и синий (голубой), смесь которых является бесцветной.

Согласно постулату бесцветности все наблюдаемые в природе адроны бесцветны (кварки в адронах образуют бесцветные комбинации). Соответственно, антикварками приписывается антицвет. Сильное взаимодействие вызывает притяжение либо двух частиц с противоположным цветом (цвет и антицвет), либо трех частиц с определенной комбинацией цветов, которая в сумме дает «белый» цвет. Из-за такой аналогии с восприятием цвета и был выбран такой термин для данного квантового числа.

Цветовое взаимодействие между кварками осуществляется посредством обмена *глюонами*.

Глюон (англ. glue - клей) - безмассовая элементарная частица со спином, равным 1, являющаяся переносчиком сильного (цветового) взаимодействия между кварками, которое склеивает их в адроны. Всего существует восемь видов (цветовых комбинаций) глюонов. Глюоны являются квантами векторного поля в квантовой хромодинамике.

Кварки участвуют в сильных, слабых и электромагнитных взаимодействиях. Сильные взаимодействия (обмен глюоном) могут изменять цвет кварка, но не меняют его аромат. Слабые взаимодействия, наоборот, не меняют цвет, но могут менять аромат, т.е. все ароматы квантовых чисел сохраняются при сильном и электромагнитном взаимодействиях, но не сохраняются при слабом взаимодействии.

Каждый барион состоит из трёх кварков, поскольку только в этом случае суммарный барионный заряд равен единице  $B=1$ .

Пример. Протон состоит из двух  $u$ -кварков и одного  $d$ -кварка  $p = uud (\uparrow\downarrow\uparrow)$ . Стрелками показаны ориентации спинов. Нейтрон состоит из одного  $u$ -кварка и двух  $d$ -кварков  $n = udd (\uparrow\downarrow\uparrow)$ .

У мезонов барионный заряд  $B=0$ , поэтому они состоят из пар кварк и антикварк.

Пример. Положительный пи-мезон состоит из  $u$ -кварка и  $d$ -антикварка  $\pi^+ = u\bar{d} (\uparrow\downarrow)$ .

Отрицательный пи-мезон состоит из  $u$ -антикварка и  $d$ -кварка  $\pi^- = \bar{u}d (\uparrow\downarrow)$ .

Нейтральный пи-мезон является суперпозицией состояний  $\pi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u} - d\bar{d})$ .

Силы, действующие между кварками, не ослабевают с расстоянием, т.е. для отделения кварков друг от друга требуется бесконечно большая энергия. Необычные свойства сильного взаимодействия приводят к тому, что одиночный кварк не может удалиться на какое-либо заметное расстояние от других кварков, а значит, кварки и антикварки не могут наблюдаться в свободном виде (явление, получившее название *конфайнмент*). Разлететься могут лишь «бесцветные» комбинации кварков - адроны.

#### Законы сохранения в мире элементарных частиц

Квантовые числа разделяются на точные (т. е. такие, которые связаны с физическими величинами, сохраняющимися во всех процессах) и неточные (для которых соответствующие физические величины в части процессов не сохраняются).

При всех типах взаимодействия выполняются следующие законы сохранения (точные)

Закон сохранения энергии.

Закон сохранения импульса.

Закон сохранения момента количества движения.

Закон сохранения электрического заряда.

Закон сохранения лептонного заряда.

Закон сохранения барионного заряда.

Установлено, что каждый закон сохранения связан с какой-либо симметрией в окружающем нас мире. Так законы сохранения энергии и импульса связаны с однородностью времени и пространства. Закон сохранения момента количества движения связан с симметрией пространства относительно вращений. Законы сохранения зарядов связаны с симметрией физических законов относительно специальных преобразований, описывающих частицы.

Изоспин  $I$  - определяет число частиц, входящих в один *изотопический мультиплет*.

Зарядовая четность,  $C$  (зарядовое сопряжение). Операция зарядового сопряжения переводит частицы в античастицы, т.е. меняет знаки зарядов, оставляя неизменными пространственные переменные, импульс и момент импульса.

Временная четность,  $T$  соответствует инверсии времени (направление течения времени меняется на обратное).

Комбинированная четность  $CP$  — комбинированная инверсия  $CP$  является последовательной комбинацией  $C$  и  $P$  преобразований.

$CPT$ -четность - последовательная комбинация  $C$ ,  $P$  и  $T$  преобразований.

$G$ -четность - это квантовое число, соответствующее симметрии относительно одновременной операции зарядового сопряжения и изменения знака третьей компоненты  $I_z$  изоспина.

Спин связан со строгим законом сохранения момента количества движения и потому является точным квантовым числом. Другие точные квантовые числа:  $Q$ ,  $L$ ,  $B$ ; по современным данным, они сохраняются при всех превращениях. Стабильность протона есть непосредственное выражение сохранения  $B$ . Однако, большинство квантовых чисел адронов неточные. Изотопический спин, сохраняясь в сильных взаимодействиях, не сохраняется в электромагнитных и слабых взаимодействиях. Странность и очарование сохраняются в сильных и электромагнитных взаимодействиях, но не сохраняются в слабых взаимодействиях. Слабые взаимодействия изменяют также внутреннюю и зарядовую четности. С гораздо большей степенью точности сохраняется комбинированная четность  $CP$ , однако и она нарушается в некоторых процессах, обусловленных слабыми взаимодействиями. Сохранение или несочхранение тех или иных квантовых чисел - одно из существенных проявлений различий классов взаимодействий элементарных частиц.

$CPT$ -инвариантность - это фундаментальная симметрия физических законов при преобразованиях, включающих одновременную инверсию заряда, четности и времени. Подтекст  $CPT$ -симметрии состоит в том, что зеркальное отображение нашей Вселенной - импульсы и положения всех объектов отражены в мнимой плоскости (что соответствует инверсии четности  $P$ ), вся материя заменена на антиматерию (что соответствует инверсии заряда  $C$ ), и обращена во вре-

мени (Т) - будет вести себя так же, как и наша вселенная. В любой момент соответствующих времён две вселенные будут идентичны, и преобразование СРТ запросто превратит одну в другую. СРТ-симметрия считается фундаментальным качеством физических законов.

Характеристика	Взаимодействие		
	Сильное	Электромагнитное	Слабое
Электрический заряд, $Q$	+	+	+
Энергия, $E$	+	+	+
Импульс, $p$	+	+	+
Угловой момент, $J$	+	+	+
Барионный заряд, $B$	+	+	+
Лептонный заряд $L$ .	+	+	+
Странность, $S$	+	+	-
Очарование, $Ch$	+	+	-
Красота, $b$	+	+	-
Истина, $t$	+	+	-
Изоспин, $I$	+	-	-
Проекция изоспина, $I_z$	+	+	-
Пространственная четность, $P$	+	+	-
Зарядовая четность, $C$	+	+	-
Временная четность, $T$	+	+	-
Комбинированная четность, $CP$	+	+	-
СРТ-четность	+	+	+
G-четность	+	-	-

#### Создание единой теории фундаментальных взаимодействий

Первой из теорий взаимодействий стала теория электромагнетизма, созданная Максвеллом в 1863 году. Затем в 1915 г. Эйнштейн сформулировал общую теорию относительности, описывающую гравитационное поле. Появилась идея построения единой теории фундаментальных взаимодействий (которых на тот момент было известно только два), подобно тому как Максвеллу удалось создать общее описание электрических и магнитных явлений. Такая единая теория объединила бы гравитацию и электромагнетизм в качестве частных проявлений некоего единого взаимодействия.

В течение первой половины XX века ряд физиков предприняли многочисленные попытки создания такой теории, однако ни одной полностью удовлетворительной модели выдвинуто не было. Это, в частности, связано с тем, что общая теория относительности и теория электромагнетизма различны по своей сути. Тяготение описывается искривлением пространства-времени, и в этом смысле гравитационное поле нематериально, в то время как электромагнитное поле является *материей*.

Во второй половине XX столетия задача построения единой теории осложнилась необходимостью внесения в неё слабого и сильного взаимодействий, а также квантования теории.

В 1967 году Саламом и Вайнбергом была создана теория электрослабого взаимодействия, объединившая электромагнетизм и слабые взаимодействия. Позднее в 1973 году была предложена теория сильного взаимодействия (квантовая хромодинамика). На их основе была построена *Стандартная Модель* элементарных частиц, описывающая электромагнитное, слабые и сильное взаимодействия.

Экспериментальная проверка Стандартной Модели заключается в обнаружении предсказанных ею частиц и их свойств. В настоящий момент открыты все элементарные частицы Стандартной Модели, за исключением хиггсовского бозона.

*Бозон Хиггса*, или Хиггсовский бозон - теоретически предсказанная элементарная частица, квант поля Хиггса, с необходимостью возникающая в Стандартной Модели вследствие

хиггсовского механизма спонтанного нарушения электрослабой симметрии. Хиггсовский бозон обладает нулевым спином. Существование бозона предсказано Питером Хиггсом в 1960 году. В рамках Стандартной Модели бозон Хиггса отвечает за массу элементарных частиц.

Бозон Хиггса - последняя до сих пор не найденная частица Стандартной модели. Частица Хиггса так важна, что нобелевский лауреат Леон Ледерман назвал её «частицей-богом». Однако, в средствах массовой информации бозон Хиггса «обозвали» как «частица Бога».

Стандартная модель в значительной степени рассматривается скорее как теория временная, а не действительно фундаментальная, поскольку она не включает в себя гравитацию и содержит несколько десятков свободных параметров (массы частиц и т. д.), значения которых не вытекают непосредственно из теории. Возможно, существуют элементарные частицы, которые не описываются Стандартной моделью - например, такие, как гравитон (частица, переносящая гравитационные силы) или суперсимметричные партнёры обычных частиц.

Таким образом, в настоящее время фундаментальные взаимодействия описываются двумя общепринятыми теориями: общей теорией относительности и Стандартной Моделью. Их объединения пока достичь не удалось из-за трудностей создания квантовой теории гравитации. Для дальнейшего объединения фундаментальных взаимодействий используются различные подходы: *теории струн*, *петлевая квантовая гравитация*, а также *М-теория*.

#### Античастицы

Античастицы - элементарные частицы, имеющие те же значения масс, спинов и др. физ. характеристик, что и их «двойники» - «частицы», но отличающиеся от них знаками некоторых характеристик взаимодействия (например знаком электрического заряда).

Существование античастиц было предсказано П. А. М. Дираком. Полученное им в 1928 квантовое релятивистское уравнение движения электрона с необходимостью содержало решения с отрицательными энергиями. В дальнейшем было показано, что исчезновение электрона с отрицательной энергией следует интерпретировать как возникновение частицы (той же массы) с положительной энергией и с положительным электрическим зарядом, т. е. античастицей по отношению к электрону. Эта частица - *позитрон* - открыта в 1932.

В последующих экспериментах было установлено, что не только электрон, но и все остальные частицы имеют свои античастицы. К настоящему времени античастицы наблюдались практически для всех известных частиц. Между частицей и её античастицей возможна аннигиляция.

*Аннигиляция* пары частица-античастица (от латинского *annihilatio* - уничтожение, исчезновение) - один из видов взаимопревращения элементарных частиц. Термином аннигиляция первоначально был назван электромагнитный процесс превращения электрона и его *античастицы* - позитрона при их столкновении в электромагнитное излучение (в фотоны). Однако этот термин неудачен, т. к. в процессах аннигиляции материя не уничтожается, а лишь превращается из одной формы в другую.

Существование и свойства античастиц определяются в соответствии с фундаментальным принципом квантовой теории поля - её инвариантностью относительно *CPT*-преобразования. Из *CPT*-теоремы следует, что масса, спин и время жизни частицы и её античастица должны быть одинаковыми. В частности, стабильным (относительно распада) частицам соответствуют стабильные античастицы (однако в веществе сколько-нибудь длительное существование их невозможно из-за *аннигиляции* с частицами вещества). Состояния частиц и их античастиц связаны операцией *зарядового сопряжения*.

Поэтому частица и её античастица имеют противоположные знаки электрических зарядов (и магнитных моментов), имеют одинаковый *изотопический спин*, но отличаются знаком его третьей проекции, имеют одинаковые по величине, но противоположные по знаку *странность*, *очарование*, *красоту* и т. д. Преобразование *комбинированной инверсии* (*CP*) связывает спиральные состояния частицы с состояниями античастиц противоположной спиральности. Частицам и их античастицам приписываются одинаковые по величине, но противоположные по знаку барионное и лептонное числа.



Вследствие инвариантности относительно зарядового сопряжения (*C*-инвариантности) сильного и электромагнитного взаимодействий связанные соответствующими силами составные объекты из частиц (атомные ядра, атомы) и из античастиц (ядра и атомы *антивещества*) должны иметь идентичную структуру. По той же причине совпадает структура адронов и их античастиц, причём в рамках модели *кварков* состояния антибарионов описываются точно так же, как состояния барионов с заменой составляющих кварков на соответствующие им *антикварки*. Состояния мезонов и их античастиц отличаются заменой составляющих кварка и антикварка на соответствующие антикварк и кварк. Для *истинно нейтральных частиц* состояния частицы и античастицы совпадают. Такие частицы обладают определёнными *зарядовой чётностью* (*C*-чётностью) и *CP*-чётностью. Все известные истинно нейтральные частицы - бозоны (напр.,  $\pi^0$  - мезон - со спином фотон - со спином 1), однако в принципе могут существовать и истинно нейтральные фермионы (так называемые *майорановские частицы*).

Само определение того, что называть «частицей» в паре частица- античастица, в значительной мере условно. Однако при данном выборе «частицы» её античастица определяется однозначно. Сохранение барионного числа в процессах слабого взаимодействия позволяет по цепочке распадов барионов определить «частицу» в любой паре барион-антибарион. Выбор электрона как «частицы» в паре электрон-позитрон фиксирует (вследствие сохранения лептонного числа в процессах слабого взаимодействия) определение состояния «частицы» в паре электронных нейтрино-антинейтрино.

Рождение античастиц происходит в столкновениях частиц вещества, разогнанных до энергий, превосходящих порог рождения пары частица- античастица. В лабораторных условиях античастицы рождаются во взаимодействиях частиц на ускорителях; хранение образующихся античастиц осуществляют в *накопительных кольцах* при высоком вакууме. В естественных условиях античастицы рождаются при взаимодействии первичных космических лучей с веществом, например, атмосферы Земли, а также должны рождаться в окрестностях *пульсаров* и активных ядер галактик. Теоретическая астрофизика рассматривает образование античастиц (позитронов, антинуклонов) при аккреции вещества на *чёрные дыры*. В рамках современной космологии рассматривают рождение античастиц при испарении первичных чёрных дыр малой массы.

При энергиях, превышающих энергию покоя частиц данного, пары частица- античастица присутствуют в равновесии с веществом и электромагнитным излучением. Такие условия могут реализовываться для электрон-позитронных пар в горячих ядрах массивных звёзд. Согласно теории горячей Вселенной, на очень ранних стадиях расширения Вселенной в равновесии с веществом и излучением находились пары частица- античастица всех сортов. В соответствии с моделями *великого объединения* эффекты нарушения *C*-и *CP*-инвариантности в неравновесных процессах с несохранением барионного числа могли привести в очень ранней Вселенной к *барионной асимметрии Вселенной* даже в условиях строгого начального равенства числа частиц и античастиц. Это даёт физическое обоснование отсутствию наблюдательных данных о существовании во Вселенной объектов из античастиц.

#### Вакуум

Под физическим вакуумом в современной физике понимают полностью лишённое вещества пространство. Даже если бы удалось получить это состояние на практике, оно не было бы абсолютной пустотой. Квантовая теория поля утверждает, что, в согласии с принципом неопределённости, в физическом вакууме постоянно рождаются и исчезают виртуальные частицы: происходят так называемые нулевые колебания полей. В том числе, возможно даже рождение заряженных частиц в паре со своей античастицей. Эта пара может существовать очень короткое

время, в пределах квантовой неопределённости  $\Delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta E}$ , чтобы не нарушать закон сохранения энергии. Но если на вакуум воздействует внешнее поле, то за счёт его энергии возможно рождение реальных частиц. Взаимодействие частиц с вакуумом приводит к изменению массы и заряда частиц.

*Поляризация вакуума* в квантовой электродинамике заключается в образовании виртуальных электронно-позитронных (а также мюон-антимюонных и таон-антитаонных) пар из вакуума под влиянием электромагнитного поля. Поляризация вакуума приводит к радиационным поправкам к законам квантовой электродинамики и к взаимодействию нейтральных частиц с электромагнитным полем. Так, лэмбовский сдвиг атомных уровней объясняется нулевыми колебаниями электромагнитного поля в физическом вакууме.

### Стандартная модель

Стандартная модель - теоретическая конструкция в физике элементарных частиц, описывающая электромагнитное, слабое и сильное взаимодействие всех элементарных частиц. Стандартная модель *не включает* в себя гравитацию.

Стандартная модель состоит из следующих положений:

Всё вещество состоит из 12 фундаментальных частиц-фермионов: 6 лептонов (электрон, мюон, тау-лептон, электронное нейтрино, мюонное нейтрино и тау-нейтрино) и 6 кварков ( $u, d, s, c, b, t$ ), которые можно объединить в три поколения фермионов.

Кварки участвуют в сильных, слабых и электромагнитных взаимодействиях; заряженные лептоны (электрон, мюон, тау-лептон) - в слабых и электромагнитных; нейтрино - только в слабых взаимодействиях.

Все три типа взаимодействий возникают как следствие постулата, что наш мир симметричен относительно трёх типов калибровочных преобразований.

Частицами-переносчиками взаимодействий являются:

8 глюонов для сильного взаимодействия (группа симметрии  $SU(3)$ );

3 тяжёлых калибровочных бозона ( $W^+, W^-, Z^0$ ) для слабого взаимодействия (группа симметрии  $SU(2)$ );

один фотон для электромагнитного взаимодействия (группа симметрии  $U(1)$ ).

В отличие от электромагнитного и сильного, слабое взаимодействие может смешивать фермионы из разных поколений, что приводит к нестабильности всех частиц, за исключением легчайших, и к таким эффектам, как нарушение  $CP$  – инвариантности и нейтринные осцилляции.

До сих пор все предсказания Стандартной модели подтверждались экспериментально, иногда с очень высокой точностью в миллионные доли процента. Только в последние годы стали появляться результаты, в которых предсказания Стандартной модели *слегка* расходятся с экспериментом и даже явления, крайне трудно поддающиеся интерпретации в её рамках.

С другой стороны, очевидно, что Стандартная модель не может являться последним словом в физике элементарных частиц, ибо она содержит слишком много внешних параметров, а также не включает гравитацию. Поэтому поиск отклонений от Стандартной модели (так называемой «новой физики») одно из самых активных направлений исследования в последние годы. Ожидается, что эксперименты на Большом Адронном коллайдере (LHC) смогут зарегистрировать множество отклонений от Стандартной модели.

*Лекция 26. Понятие о дозиметрии и защите. Космические лучи.*

*Взаимодействие ядерных излучений с веществом. Детектирование различных излучений. Понятие о дозиметрии и защите. Космические лучи, первичное и вторичное излучение. Интенсивность, состав и энергетический спектр. Высотный ход интенсивности космических лучей. Взаимодействие первичного космического излучения с магнитным полем Земли. Широтный эффект. Радиационные пояса. Происхождение космических лучей.*

### Ионизирующие излучения

Ионизирующие излучения, излучения, взаимодействие которых со средой приводит, в конечном счёте, к ионизации атомов и молекул. К ионизирующим излучениям относятся: электромагнитное излучение, потоки  $\alpha$ -частиц, электронов, позитронов, протонов, нейтронов и других заряженных и нейтральных частиц. Заряженные частицы ионизуют атомы вещества непосредственно при столкновениях, если их кинетическая энергия достаточна для ионизации. При прохождении через среду потоков нейтральных частиц (нейтронов) или фотонов (квантов рентгеновского и  $\gamma$ -излучений) ионизация обусловлена *вторичными заряженными* частицами, возникающими в результате взаимодействия первичных частиц со средой.

Ионизирующие излучения играют большую роль в различных физических и химических процессах, в биологии, медицине, сельском хозяйстве и промышленности. Многие химические реакции под влиянием ионизирующего излучения осуществляются с большей лёгкостью или протекают при значительно меньших температурах и давлениях. Ионизирующие излучения применяются для стерилизации, пастеризации и хранения пищевых продуктов, фармацевтических препаратов и т. д. В результате действия ионизирующих излучений можно получить разнообразные мутации у микроорганизмов и растений (так называемое биологическое действие ионизирующих излучений).

*Радиационные эффекты* в твёрдом теле - это различные явления в твёрдом теле, вызванные воздействием ионизирующих излучений (потоков ядерных частиц, рентгеновского и  $\gamma$ -излучений). Взаимодействуя с кристаллической решёткой, частицы и кванты вызывают образование в ней вакансий и междоузельных атомов, ионизацию, иногда появление примесей за счёт деления атомных ядер, ядерных реакций. Облучение вызывает изменение физических свойств кристаллов (механических, оптических, электрических и др.). В ряде случаев облучение потоком ускоренных ионов применяется для изменения свойств поверхностных слоев твёрдых тел (ионное внедрение). Изменения свойств полимеров при облучении обусловлены радиационно-химическими превращениями.

### Детекторы ядерных излучений

Детекторы ядерных излучений - приборы для регистрации  $\alpha$ - и  $\beta$ -частиц, рентгеновского и  $\gamma$ -излучения, нейтронов, протонов и т.п. Служат для определения состава излучения и измерения его интенсивности, измерения спектра энергий частиц, изучения процессов взаимодействия быстрых частиц с атомными ядрами и процессов распада нестабильных частиц. Для последней наиболее сложной группы задач особенно полезны детекторы ядерных излучений, позволяющие запечатлевать траектории отдельных частиц - камера Вильсона и её разновидности: диффузионная камера, пузырьковая камера, искровая камера, ядерные фотографические эмульсии. Действие всех детекторов ядерных излучений основано на ионизации или возбуждении заряженными частицами атомов вещества, заполняющего рабочий объём детекторов ядерных излучений. В случае  $\gamma$ -квантов и нейтронов ионизацию и возбуждение производят вторичные заряженные частицы, возникающие в результате взаимодействия  $\gamma$ -квантов или нейтронов с рабочим веществом детектора. Таким образом, прохождение всех ядерных частиц через вещество сопровождается образованием свободных электронов, ионов, возникновением световых вспышек (сцинтилляций), а также химическими и тепловыми эффектами. В результате этого излучения могут быть зарегистрированы по появлению электрических сигналов (тока или импульсов напряжения) на выходе детекторов ядерных излучений, либо по почернению фотоэмульсии и др.

Электрические сигналы обычно невелики и требуют усиления. Мерой интенсивности потока ядерных частиц является сила тока на выходе детекторов ядерных излучений, средняя частота следования электрических импульсов, степень почернения фотоэмульсии и т.д.

Важной характеристикой детекторов ядерных излучений, регистрирующих отдельные частицы, является их эффективность - вероятность регистрации частицы при попадании её в рабочий объём детектора ядерных излучений. Эффективность определяется конструкцией детектора ядерных излучений и свойствами рабочего вещества. Для заряженных частиц (за исключением очень медленных) она близка к единице; эффективность регистрации нейтронов и  $\gamma$ -квантов обычно меньше единицы и зависит от их энергии. Нередко необходимо, чтобы детекторы ядерных излучений был чувствителен только к частицам одного вида (например, нейтронный детектор не должен регистрировать  $\gamma$ -кванты).

Простейшим детектором ядерных излучений является *ионизационная камера*. Она представляет собой помещённый в герметическую камеру заряженный электрический конденсатор, заполненный газом. Если в камеру влетает заряженная частица, то в электрической цепи, связанной с электродами камеры, возникает ток, обусловленный ионизацией атомов газа; сила тока является мерой интенсивности потока частиц. Камеры используются также и в режиме регистрации импульса напряжения, вызываемого отдельной частицей; величина импульса пропорциональна энергии, потерянной частицей в газе камеры. Ионизационные камеры регистрируют все виды ядерных излучений, но их конструкция и состав газа зависят от типа регистрируемого излучения.

При увеличении разности потенциалов между электродами камеры электроны, возникающие в рабочем объёме камеры, при своём движении к электроду приобретают энергию, достаточную для вторичной ионизации нейтральных молекул газа. Благодаря этому импульс напряжения на выходе возрастает и его легче регистрировать. На таком же принципе основана работа пропорционального счётчика, применяемого для измерения интенсивности потока и энергии частиц и квантов.

В *счётчике Гейгера-Мюллера* напряжённость электрического поля между электродами имеет ещё большую величину, что приводит к возрастанию ионизационного тока за счёт вторичной ионизации. Амплитуда импульса на выходе перестаёт быть пропорциональной энергии первичной частицы, однако эта амплитуда становится весьма большой, что облегчает регистрацию импульсов. Счётчики Гейгера-Мюллера благодаря простоте конструкции получили широкое распространение для регистрации  $\alpha$ -,  $\beta$ -частиц и  $\gamma$ -квантов.

Действие *сцинтилляционного детектора* основано на явлении флуоресценции (световых вспышках), возникающей при взаимодействии ядерных частиц со *сцинтилляторами* - специальными жидкостями, пластмассами, кристаллами, а также благородными газами. Световая вспышка регистрируется *фотоэлектронным умножителем*, преобразующим её в электрический импульс. Сцинтилляционные детекторы ядерных излучений обладают высокой эффективностью для  $\gamma$ -квантов и быстродействием. Амплитуды выходного сигнала пропорциональны энергии, переданной сцинтиллятору частицей, что позволяет использовать эти детекторы для измерения энергии ядерных частиц. Высокая эффективность сцинтилляционных детекторов ядерных излучений обусловлена тем, что, в отличие от ионизационных камер, пропорциональных счётчиков и счётчиков Гейгера-Мюллера, рабочее вещество детектора является плотным и поглощающая способность его примерно в тысячу раз превосходит поглощающую способность газа при нормальном давлении.

Высокой эффективностью обладает также *кристаллический счётчик*. Его действие аналогично действию ионизационной камеры. Если в ионизационной камере заряженная частица образует свободные электроны и ионы, то в кристаллическом диэлектрическом (алмаз, сернистый цинк и др.) счётчике возникают электронно-дырочные пары. Кристаллические счётчики применяются сравнительно редко.

Использование в качестве рабочего вещества полупроводниковых кристаллов (обычно кремния или германия с примесью лития) позволяет наряду с высокой эффективностью получать очень хорошее энергетическое разрешение, превышающее разрешающую способность

сцинтилляционных детекторов ядерных излучений и сравнимое с разрешением, достигаемым в гораздо менее светосильных магнитных спектрометрах. Поэтому полупроводниковые детекторы ядерных излучений широко применяются для прецизионных измерений энергетического спектра ядерного излучения. Некоторые типы полупроводниковых детекторов необходимо охлаждать до температур, близких к температуре жидкого азота.

Для измерения энергии очень быстрых частиц находит применение черенковский счётчик, основанный на регистрации излучения Вавилова-Черенкова. Для регистрации быстрых тяжёлых ионов, например осколков деления ядер, иногда используют диэлектрические детекторы.

### Дозиметрия

Дозиметрия - область прикладной физики, в которой изучаются физические величины, характеризующие действие ионизирующих излучений на объекты живой и неживой природы, в частности дозы излучения, а также методы и приборы для измерения этих величин.

Развитие дозиметрии первоначально определялось необходимостью защиты человека от ионизирующих излучений. Вскоре после открытия рентгеновских лучей были замечены биологические эффекты, возникающие при облучении человека.

Появилась необходимость в количественной оценке степени радиационной опасности. В качестве основного количественного критерия была принята *экспозиционная доза*, измеряемая в *Рентгенах* и определяемая по величине ионизации воздуха.

С открытием радия было обнаружено, что  $\beta$ - и  $\gamma$ -излучения радиоактивных веществ вызывают биологические эффекты, похожие на те, которые вызываются рентгеновским излучением. При добыче, обработке и применении радиоактивных препаратов возникает опасность попадания радиоактивных веществ внутрь организма. Развились методы измерения активности радиоактивных источников, являющиеся основой *радиометрии*.

Разработка и строительство ядерных реакторов и ускорителей заряженных частиц, развитие ядерной энергетики и массовое производство радиоактивных изотопов привели к большому разнообразию видов ионизирующих излучений и к созданию многообразных дозиметрических приборов (дозиметров).

Исследования биологического действия ионизирующих излучений на клеточном и молекулярном уровнях вызвали развитие микродозиметрии, исследующей передачу энергии излучения микроструктурам вещества.

### Доза

Доза ионизирующего излучения - энергия ионизирующего излучения, поглощённая в единице массы облучаемого вещества. В этом смысле доза излучения называется также *поглощённой дозой* ( $D_{\Pi}$ ). Поглощённая энергия расходуется на нагрев вещества, а также на его химические и физические превращения. Величина дозы зависит от вида излучения (рентгеновское излучение, поток нейтронов и т.п.), энергии его частиц, плотности их потока и состава облучаемого вещества. При прочих равных условиях доза тем больше, чем больше время облучения. Таким образом, доза накапливается со временем. Доза, отнесённая к единице времени, называется *мощностью дозы*.

Зависимость величины дозы от энергии частиц, плотности их потока и состава облучаемого вещества различна для разных видов излучения. Например, для рентгеновского и  $\gamma$ -излучений доза зависит от атомного номера  $Z$  элементов, входящих в состав вещества; характер этой зависимости определяется энергией фотонов. Для этих видов излучений доза в тяжёлых веществах больше, чем в лёгких при одинаковых условиях облучения.

Нейтроны также взаимодействуют с ядрами атомов. Характер этого взаимодействия существенно зависит от энергии нейтронов. Если происходят упругие соударения нейтронов с ядрами, то средняя величина энергии, переданной ядру в одном акте взаимодействия, оказывается большей для лёгких ядер. В этом случае (при одинаковых условиях облучения) поглощённая доза в лёгком веществе будет выше, чем в тяжёлом.

Другие виды ионизирующих излучений имеют свои особенности взаимодействия с веществом, которые определяют зависимость дозы от энергии излучения и состава вещества. По-

поглощённая доза в системе единиц СИ измеряется в Дж/кг. Широко распространена внесистемная единица *рад*:  $1 \text{ рад} = 10^{-2} \text{ Дж/кг}$ . Мощность дозы измеряется в рад/сек, рад/ч и т.п.

Кроме поглощённой дозы, существуют понятия *экспозиционной* и *эквивалентной* дозы. *Экспозиционная доза* - мера ионизации воздуха под действием рентгеновского и  $\gamma$ -излучений — измеряется количеством образованных зарядов. Единицей экспозиционной дозы в системе СИ является Кл/кг. Экспозиционная доза в 1 Кл/кг означает, что суммарный заряд всех ионов одного знака, образованных в 1 кг воздуха, равен одному Кулону.

Широко распространена внесистемная единица экспозиционной дозы – *Рентген*.

: *Рентген* - внесистемная единица экспозиционной дозы рентгеновского и  $\gamma$ -излучений, определяемая по ионизационному действию их на воздух. Названа в честь В. К. Рентгена; обозначения: русское «Р», международное «R». Под действием квантов рентгеновского или  $\gamma$ -излучения происходит ионизация молекул воздуха, приводящая к образованию пар заряженных частиц, в том числе электронов со значительной кинетической энергией. Эти электроны в свою очередь ионизируют воздух. 1 Р есть экспозиционная доза рентгеновского или  $\gamma$ -излучения, при котором соответствующее ему корпускулярное излучение (т. е. электроны) производит в 0,001293 г воздуха (в 1 см<sup>3</sup> воздуха при нормальных условиях - при 0°C и 760 мм рт. ст.) такое число ионов, что их суммарный заряд равен 0,1 Кл для каждого знака. При этом имеется в виду, что заряженные частицы, образовавшиеся в 1 см<sup>3</sup> воздуха, израсходуют всю полученную энергию на ионизацию. Согласно определению, Рентген может применяться лишь для излучений с энергией квантов не более 3 Мэв. Дозе в 1 Р соответствует образование  $2,08 \cdot 10^9$  пар ионов в 1 см<sup>3</sup> воздуха или  $1,61 \cdot 10^{12}$  пар в 1 г воздуха.  $1 \text{ Р} = 2,57976 \cdot 10^{-4} \text{ Кл/кг}$ . При средней энергии ионизации молекул воздуха около 33 эВ 1 Р эквивалентен  $85 \cdot 10^{-4} \text{ Дж/г}$ . Эта величина называется *физическим эквивалентом рентгена* (фэр).

По величине экспозиционной дозы можно рассчитать поглощённую дозу рентгеновского и  $\gamma$ -излучений в любом веществе. Для этого необходимо знать состав вещества и энергию фотонов излучения.

При облучении живых организмов, в частности человека, возникают биологические эффекты, величина которых определяет степень радиационной опасности. Для данного вида излучения наблюдаемые радиационные эффекты во многих случаях пропорциональны поглощённой энергии. Однако при одной и той же поглощённой дозе в тканях организма биологический эффект оказывается различным для разных видов излучения. Следовательно, знание величины поглощённой дозы оказывается недостаточным для оценки степени радиационной опасности. Принято сравнивать биологические эффекты, вызываемые любыми ионизирующими излучениями, с биологическими эффектами, вызываемыми рентгеновским и  $\gamma$ -излучениями. Коэффициент, показывающий во сколько раз радиационная опасность для данного вида излучения выше, чем радиационная опасность для рентгеновского излучения при одинаковой поглощённой дозе в тканях организма, называется *коэффициентом качества* К. Для рентгеновского и  $\gamma$ -излучений  $K=1$ . Для всех других ионизирующих излучений коэффициент качества устанавливается на основании радиобиологических данных. Коэффициент качества может быть разным для различных энергий одного и того же вида излучения. Например, для тепловых нейтронов  $K=3$ , для нейтронов с энергией 0,5 МэВ  $K=10$ , а для нейтронов с энергией 5,0 МэВ  $K=7$ . Эквивалентная доза  $D_3$  определяется как произведение поглощённой  $D_{\Pi}$  на коэффициент качества излучения К:

$$D_3 = D_{\Pi} \cdot K$$

Т.к. коэффициент К является безразмерной величиной, то эквивалентная доза измеряется в тех же единицах, что и поглощённая.

Однако существует специальная единица эквивалентной дозы – бэр. Бэр (биологический эквивалент рентгена) (англ. REM - roentgen equivalent man) - внесистемная единица измерения эквивалентной дозы. 1 бэр соответствует такому облучению живого организма данным видом излучения, при котором наблюдается тот же биологический эффект, что и при экспозиционной дозе  $\gamma$ -излучения в 1 рентген.

В СИ бэр имеет ту же размерность и значение, что и рад - обе единицы равны 0,01 Дж/кг для излучений с коэффициентом качества, равным единице. 100 бэр равны 1 *зиверту*.

Эквивалентная доза в 1 бэр численно равна поглощённой дозе в 1 рад, умноженной на коэффициент качества К. Поскольку бэр достаточно большая единица измерения, обычно эквивалентную дозу измеряют в миллибэрах (мбэр,  $10^{-3}$  бэр) или микрозивертах (мкЗв,  $10^{-6}$  Зв).

Таким образом, одинаковой величине эквивалентной дозе соответствует одинаковая радиационная опасность, которой подвергается человек при воздействии на него любого вида излучения. Естественные источники ионизирующего излучения (космические лучи, естественная радиоактивность почвы, воды, воздуха, а также радиоактивность, содержащаяся в теле человека) создают в среднем мощность эквивалентной дозе 125 мбэр в год.

Эквивалентная доза в 400-500 бэр, полученная за короткое время при облучении всего организма, может привести к смертельному исходу (без специальных мер лечения). Однако такая же эквивалентная дозе, полученная человеком *равномерно* в течение всей его жизни, не приводит к видимым изменениям его состояния.

Эквивалентная дозе в 5 бэр в год считается предельно допустимой дозой (ПДД) при профессиональном облучении.

Минимальная доза  $\gamma$ -излучения, вызывающая подавление способности к размножению некоторых клеток после однократного облучения, составляет 5 бэр. При длительных ежедневных воздействиях дозе в 0,02-0,05 бэр наблюдаются начальные изменения крови, а доза в 0,11 бэр - образование опухолей. Об отдалённых последствиях облучения судят по увеличению частоты мутаций у потомков. Доза, удваивающая частоту спонтанных мутаций у человека, вероятно, не превышает 100 бэр на поколение. При местном облучении, например с целью лечения злокачественных опухолей, применяют (при соблюдении защиты всего организма) высокие Д. (6000-10000 бэр за 3-4 недели) рентгеновских или  $\gamma$ -лучей (лучевая терапия).

В радиобиологии различают следующие дозы, приводящие к гибели животных в ранние и поздние сроки. Дозы, вызывающая гибель 50% животных за 30 дней (так называемая летальная доза - ЛД<sub>30/50</sub>), составляет при однократном одностороннем рентгеновском или  $\gamma$ -облучениях для морской свинки 300 бэр, для кролика 1000 бэр. Минимальная абсолютно летальная доза (МАЛД) для человека при общем  $\gamma$ -облучении равна 600 бэр. С увеличением дозы продолжительность жизни животных сокращается, пока она не достигает 2,8 - 3,5 сут, дальнейшее увеличение дозы не меняет этого срока. Лишь дозы выше 10000-20000 бэр сокращают продолжительность жизни до одних суток, а при последующем облучении - до нескольких часов. При дозе в 15000-25000 бэр отмечаются случаи «смерти под лучом». Каждому диапазону дозы соответствует определённая форма лучевого поражения. Ряд беспозвоночных животных, растений и микроорганизмов обладает значительно более низкой чувствительностью.

Лучевое повреждение организма сопровождается одновременно текущим процессом восстановления, который связан с нормализацией обмена веществ и регенерацией клеток. Поэтому облучение дробное или с малой мощностью доз вызывает меньшее повреждение, чем массивное воздействие. Изучение процессов восстановления важно для поисков радиозащитных веществ, а также средств и методов защиты организма от излучений. В небольших дозах все обитатели Земли постоянно подвержены действию ионизирующего излучения - космических лучей и радиоактивных изотопов, входящих в состав самих организмов и окружающей среды. Испытания атомного оружия и мирное применение атомной энергии повышают радиоактивный фон. Это делает изучение биологического действия ионизирующих излучений и поиски защитных средств всё более важными.

Биологическим действием ионизирующих излучений пользуются в биологических исследованиях, в медицинской и сельскохозяйственной практике. На биологическом действии ионизирующих излучений основаны лучевая терапия, рентгенодиагностика, радиоизотопная терапия.

Измерение дозы излучения с целью предсказания радиационного эффекта осуществляют дозиметрами.

#### Дозиметрические приборы

Дозиметрические приборы (дозиметры) - устройства, предназначенные для измерения доз ионизирующих излучений или величин, связанных с дозами. Дозиметры могут служить для измерения доз одного вида излучения ( $\gamma$ -дозиметры, нейтронные дозиметры и т. д.) или смешанного излучения.

Дозиметры для измерения экспозиционных доз рентгеновского и  $\gamma$ -излучений обычно градуируют в Рентгенах и называются *рентгенметрами*. Дозиметры для измерения эквивалентной дозы, характеризующей степень радиационной опасности, иногда градуируют в Бэрах и их часто называют бэрметрами. Радиометрами измеряют активности или концентрацию радиоактивных веществ.

Типичная блок-схема дозиметра состоит из детектора и измерительных устройств. В детекторе происходит поглощение энергии излучения, приводящее к возникновению радиационных эффектов, величина которых измеряется с помощью измерительных устройств. По отношению к измерительной аппаратуре детектор является датчиком сигналов. Показания дозиметров регистрируются выходным устройством (стрелочные приборы, самописцы, электромеханические счётчики, звуковые или световые сигнализаторы и т. п.).

По способу эксплуатации различают дозиметры стационарные, переносные (можно переносить только в выключенном состоянии) и носимые. Дозиметры для измерения дозы излучения, получаемой каждым человеком, находящимся в зоне облучения, называются индивидуальным дозиметром.

В зависимости от типа детектора различают: ионизационные дозиметры, сцинтилляционные, люминесцентные, полупроводниковые, фотодозиметры и т. д.

В случае ионизационных камер состав газа и вещества стенок выбирают таким, чтобы при тождественных условиях облучения обеспечивалось одинаковое поглощение энергии (в расчёте на единицу массы) в камере и биологической ткани. В дозиметрах для измерения экспозиционных доз камеры наполняют воздухом.

К числу устройств, накапливающих информацию о дозе излучения, относятся дозиметры, в которых детектором служат специальные сорта фоточувствительных плёнок. Оптическая плотность почернения (после химической обработки) является мерой дозы излучения.

#### Радиационная защита

*Радиационная защита* - система регламентации воздействия ионизирующих излучений, направленная на защиту населения и профессиональных работников, а также, изыскание способов ослабления поражающего действия ионизирующих излучений; одно из направлений радиобиологии.

Защита включает в себя:

- профессиональную защиту от радиации (защита рабочих)
- медицинскую защиту от радиации (защита пациентов)
- общественную защиту от радиации (защита населения).

Основными способами защиты от ионизирующих излучений являются:

- защита расстоянием;
- защита временем;
- защита экранированием:
  - от  $\alpha$ -излучения - лист бумаги, резиновые перчатки, респиратор;
  - от  $\beta$ -излучения - плексиглас, тонкий слой алюминия, стекло, противогаз;
  - от  $\gamma$ -излучения - тяжёлые металлы (вольфрам, свинец, сталь, чугун и пр.);
  - от нейтронов - вода, полиэтилен, другие полимеры;
- химические средства дезактивации.

Химическая защита от ионизирующего излучения - это ослабление результата воздействия излучения на организм при условии введения в него химических веществ, называемых *радиопротекторами*. Биологическая - представляет собой комплекс репарирующих ферментов и др.



### Космические лучи

Космические лучи - элементарные частицы и ядра атомов, родившиеся и ускоренные до высоких энергий во Вселенной.

Космические лучи можно классифицировать по их происхождению:

- 1) вне нашей Галактики;
- 2) в нашей Галактике;
- 3) на Солнце;
- 4) в межпланетном пространстве.

Различают *первичные* космические лучи - космические лучи до входа в атмосферу и *вторичные* космические лучи, образовавшиеся в результате процессов взаимодействия первичных космических лучей с атмосферой Земли.

Космические лучи являются составляющей естественной радиации (фоновой радиации) на поверхности Земли и в атмосфере.

Химический спектр космических лучей в пересчете энергии на нуклон более чем на 94% состоит из протонов, ещё на 4% - из ядер гелия ( $\alpha$ -частиц). Есть также ядра других элементов, но их доля значительно меньше. В пересчете энергии на частицу доля протонов составляет около 35%, доля тяжёлых ядер соответственно больше.

Традиционно частицы, наблюдаемые в космических лучах, делят на следующие группы: L, M, H, VH (соответственно, легкие, средние, тяжелые и сверхтяжелые). Особенностью химического состава первичного космического излучения является аномально высокое (в несколько тысяч раз) содержание ядер группы L (литий, бериллий, бор) по сравнению с составом звёзд и межзвёздного газа. Данное явление объясняется тем, что частицы космических лучей под воздействием галактического магнитного поля хаотически блуждали в пространстве около 7 млн лет, прежде чем достигнуть Земли. За это время ядра группы VH могут неупруго провзаимодействовать с протонами межзвёздного газа и расколоться на более легкие фракции. Данное предположение подтверждается тем, что космические лучи обладают очень высокой степенью изотропии.

Космические лучи были открыты в 1912 г. В. Гессом в опытах по изучению проводимости газов. Обнаруженный спонтанный электрический ток в газе не удавалось объяснить ионизацией, возникающей от естественной радиоактивности Земли. Наблюдаемое излучение оказалось настолько проникающим, что в ионизационных камерах, экранированных толстыми слоями свинца, все равно наблюдался остаточный ток. Был проведен ряд экспериментов с ионизационными камерами на воздушных шарах. Гесс обнаружил, что излучение растет с высотой, в то время как ионизация, вызванная радиоактивностью Земли, должна была бы падать с высотой. В дальнейшем было доказано, что это излучение направлено сверху вниз.

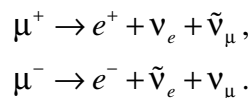
В 1921-1925 годах американский физик Милликен, изучая поглощение космического излучения в атмосфере Земли в зависимости от высоты наблюдения, обнаружил, что в свинце это излучение поглощается так же, как и  $\gamma$ -излучение ядер. Милликен первым и назвал это излучение космическими лучами. В 1925 году советские физики Л.А.Тувим и Л.В. Мысовский провели измерение поглощения космического излучения в воде: оказалось, что это излучение поглощалось в десять раз слабее, чем  $\gamma$ -излучение ядер. Мысовский и Тувим обнаружили также, что интенсивность излучения зависит от барометрического давления - открыли «барометрический эффект». Опыты Д.В. Скобельцына с камерой Вильсона, помещенной в постоянное магнитное поле, дали возможность «увидеть», за счет ионизации, следы (треки) космических частиц. Скобельцын открыл ливни космических частиц. Эксперименты в космических лучах позволили сделать ряд принципиальных для физики микромира открытий. В 1932 году Андерсон открыл в космических лучах позитрон. В 1937 году Андерсоном и Неддермейером были открыты мюоны и указан тип их распада. В 1947 году открыли  $\pi$ -мезоны. В 1955 году в космических лучах установили наличие K-мезонов, а также и тяжелых нейтральных частиц - гиперонов. Квантовая характеристика «странность» появилась именно в опытах с космическими лучами. Эксперименты в космических лучах поставили вопрос о сохранении четности, обнаружили процессы множест-

венной генерации частиц в нуклонных взаимодействиях, позволили определить величину эффективного сечения взаимодействия нуклонов высокой энергии. Появление космических ракет и спутников привело к новым открытиям - обнаружению радиационных поясов Земли (1958 г., С.Н. Вернов и А.Е. Чудаков и, независимо от них в том же году, Ван Аллен), и позволило создать новые методы исследования галактического и межгалактического пространства.

В результате взаимодействия с ядрами атомов атмосферы первичные космические лучи (в основном протоны) создают большое число вторичных частиц - пионов, протонов, нейтронов, мюонов, электронов, позитронов и фотонов. Таким образом, вместо одной первичной частицы возникает большое число вторичных частиц, которые делятся на адронную, мюонную и электронно-фотонную компоненты. Такой каскад покрывает большую территорию и называется *широким атмосферным ливнем*.

В одном акте взаимодействия протон обычно теряет ~50% своей энергии, а в результате взаимодействия возникают в основном пионы. Каждое последующее взаимодействие первичной частицы добавляет в каскад новые адроны, которые летят преимущественно по направлению первичной частицы, образуя *адронный корень ливня*.

Образующиеся пионы могут взаимодействовать с ядрами атмосферы, а могут распадаться, формируя мюонную и электронно-фотонную компоненты ливня. Адронная компонента до поверхности Земли практически не доходит, превращаясь в мюоны, нейтрино и  $\gamma$ -кванты. Мюоны в свою очередь могут распадаться



Образующиеся при распаде нейтральных пионов  $\gamma$ -кванты вызывают каскад электронов и  $\gamma$ -квантов, которые в свою очередь образуют электрон-позитронные пары. Заряженные лептоны теряют энергию на ионизацию и радиационное торможение. Поверхности Земли в основном достигают релятивистские мюоны. Электронно-фотонная компонента поглощается сильнее.

Один протон с энергией  $>10^{14}$  эВ может создать  $10^6$ - $10^9$  вторичных частиц. Поток космических лучей на уровне моря примерно в 100 раз меньше потока первичных космических лучей ( $\sim 0,01 \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ).

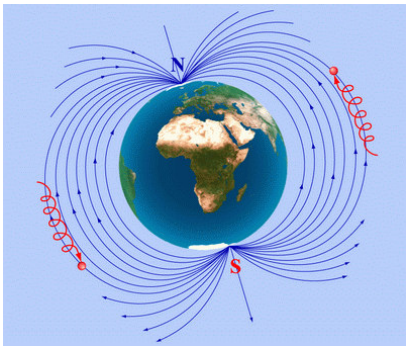
Интенсивность космических лучей на больших интервалах времени была постоянна в течение  $\sim 10^9$  лет. Однако появились данные, что 30-40 тыс. лет тому назад интенсивность космических лучей заметно отличалась от современной. Пик интенсивности связывают со взрывом близкой к Солнечной системе ( $\sim 50$  парсек) Сверхновой.

*Замечание.* Парсек (русское сокращение пк, международное сокращение: pc) - распространённая в астрономии внесистемная единица измерения расстояния. Название происходит от *параллакс угловой секунды* и обозначает расстояние до объекта, годичный тригонометрический *параллакс* (изменение видимого положения объекта относительно удалённого фона в зависимости от положения наблюдателя) которого равен одной угловой секунде. Согласно другому эквивалентному определению, парсек - это такое расстояние, с которого *средний радиус земной орбиты* (равный одной астрономической единице), перпендикулярный лучу зрения, виден под углом в одну угловую секунду ( $1''$ ):  $1 \text{ пк} \approx 206\,265 \text{ а. е.} \approx 3,08568 \cdot 10^{13} \text{ км} \approx 3,2616 \text{ световых лет}$ .

В околоземном космическом пространстве различают несколько типов космических лучей. К стационарным принято относить галактические космические лучи (ГКЛ), частицы альбедо и радиационный пояс. К нестационарным - солнечные космические лучи (СКЛ).

Основными источниками первичных космических лучей являются взрывы сверхновых звезд (галактические космические лучи) и Солнце. Большие энергии (до  $10^{16}$  эВ) галактических космических лучей объясняются ускорением частиц на ударных волнах, образующихся взрывах сверхновых. Природа космических лучей сверхвысоких энергий пока не имеет однозначной интерпретации.

#### Галактические космические лучи (ГКЛ)



Галактические космические лучи (ГКЛ) состоят из ядер различных химических элементов с кинетической энергией  $E$  более нескольких десятков МэВ/нуклон, а также электронов и позитронов с  $E > 10$  МэВ. Эти частицы приходят в межпланетное пространство из межзвёздной среды. Источником этих частиц являются сверхновые звезды нашей Галактики. Возможно, однако, что в области  $E < 100$  МэВ/нуклон частицы образуются за счет ускорения в межпланетной среде частиц солнечного ветра и межзвездного газа. Дифференциальный энергетический спектр ГКЛ носит степенной характер.

#### Солнечные космические лучи

Солнечными космическими лучами (СКЛ) называются энергичные заряженные частицы (электроны, протоны и ядра) выброшенные Солнцем в межпланетное пространство. Энергия СКЛ простирается от нескольких кэВ до нескольких ГэВ. В нижней части этого диапазона СКЛ граничат с протонами высокоскоростных потоков солнечного ветра. Частицы СКЛ появляются вследствие солнечных вспышек.

#### Космические лучи ультравысоких энергий

Энергия некоторых частиц превышает так называемый предел Грайзена-Зацепина-Кузьмина - теоретический предел энергии для космических лучей  $6 \cdot 10^{19}$  эВ. Несколько десятков таких частиц за год было зарегистрировано обсерваторией AGASA. Эти наблюдения ещё не имеют достаточно обоснованного научного объяснения.

Длительное воздействие космической радиации способно очень негативно отразиться на здоровье человека. Для дальнейшей экспансии человечества к иным планетам Солнечной системы следует разработать надёжную защиту от подобных опасностей.

#### Регистрация космических лучей

Долгое время после открытия космических лучей, методы их регистрации не отличались от методов регистрации частиц в ускорителях, чаще всего - газоразрядные счётчики или ядерные фотографические эмульсии, поднимаемые в стратосферу, или в космическое пространство. Но данный метод не позволяет вести систематические наблюдения частиц с высокой энергией, так как они появляются достаточно редко, а пространство, в котором такой счётчик может вести наблюдения, ограничено его размерами.

Современные обсерватории работают на других принципах. Когда высокоэнергетичная частица входит в атмосферу она, взаимодействуя с атомами воздуха на первых  $100 \text{ г/см}^2$ , рождает целый шквал частиц, в основном пионов и мюонов, которые в свою очередь рождают другие частицы, и так далее. Образуется конус из частиц, который называют ливнем. Такие частицы движутся со скоростью превышающей скорость света в воздухе, благодаря чему возникает черенковское свечение, регистрируемое телескопами. Такая методика позволяет следить за областями неба площадью в сотни квадратных километров.

#### Радиационный пояс.

Радиационный пояс - область магнитосфер планет, в которой накапливаются и удерживаются проникающие в магнитосферу высокоэнергичные заряженные частицы (в основном протоны и электроны).

Радиационный пояс Земли (другое название радиационный пояс Ван Аллена - *Van Allen radiation belt*) - был открыт американским учёным Джеймсом ван Алленом после полета первого американского спутника Эксплорер-1 (внутренний пояс) и независимо советскими учёными - С.Н. Верновым и А.Е. Чудаковым после полёта Спутник-3 (внешний пояс) в 1958 году.

Радиационные пояса Земли – это внутренние области земной магнитосферы в которых магнитное поле Земли удерживает заряженные частицы (*протоны, электроны,  $\alpha$ -частицы*), обладающие кинетической энергией от десятков кэВ до сотен МэВ - в разных областях радиационного пояса Земли энергия частиц различна. Выходу заряженных частиц из радиационного пояса

Земли мешает особая конфигурация силовых линий геомагнитного поля, создающего для заряженных частиц *магнитную ловушку* (или как принято говорить - *зону захвата*.)

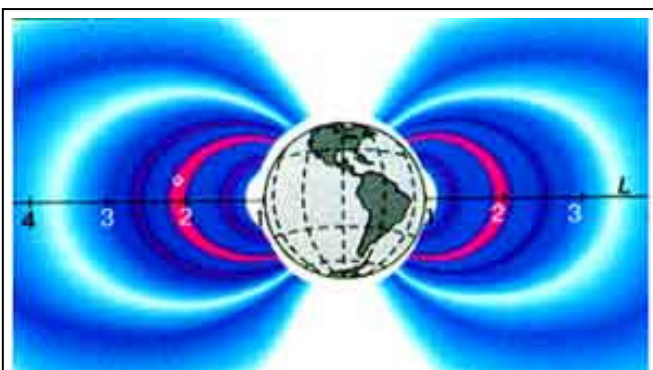
Захваченные в ловушку Земли частицы под действием *Лоренца силы* совершают сложное движение, которое можно представить как колебательное движение по спиральной траектории вдоль силовой линии поля из Северного полушария в Южное и обратно с одновременным более медленным перемещением (долготным дрейфом) вокруг Земли. Когда частица движется по спирали в сторону увеличения поля (приближаясь к Земле), радиус спирали и ее шаг уменьшаются. Вектор скорости частицы, оставаясь неизменным по величине, приближается к плоскости, перпендикулярной направлению поля. Наконец, в некоторой точке (ее называют зеркальной) происходит «отражение» частицы. Она начинает двигаться в обратном направлении - к сопряженной зеркальной точке в др. полушарии. Одно колебание вдоль силовой линии из Северного полушария в Южное протон с энергией  $\sim 100$  Мэв совершает за время  $\sim 0,3$  сек. Время нахождения («жизни») такого протона в геомагнитной ловушке может достигать 100 лет ( $\sim 3 \cdot 10^9$  сек), за это время он может совершить до  $10^{10}$  колебаний. В среднем захваченные частицы большой энергии совершают до нескольких сотен миллионов колебаний из одного полушария в другое. Долготный дрейф происходит со значительно меньшей скоростью. В зависимости от энергии частицы совершают полный оборот вокруг Земли за время от нескольких минут до суток. Положительные ионы дрейфуют в западном направлении, электроны - в восточном.

*Частицы альbedo* - это вторичные частицы, отраженные от атмосферы Земли. Нейтроны альbedo обеспечивают радиационный пояс протонами с энергией до  $10^3$  МэВ и электронами с энергией до нескольких МэВ. Максимум интенсивности протонов низких энергий расположен на расстояниях  $\sim 3$  радиусов Земли от её центра. Малоэнергичные электроны заполняют всю область захвата. Для них нет деления на внутренний и внешний пояса. Поток протонов во внутреннем поясе довольно устойчив во времени.

Процесс взаимодействия ядер первичного космического излучения с атмосферой сопровождается возникновением нейтронов. Поток нейтронов, идущий от Земли (нейтроны альbedo), беспрепятственно проходит сквозь магнитное поле Земли. Поскольку нейтроны нестабильны (среднее время распада  $\sim 900$  с), часть из них распадается в зонах, недоступных для заряженных частиц малых энергий. Таким образом, продукты распада нейтронов (протоны и электроны) рождаются прямо в зонах захвата. В зависимости от энергии и направления движения эти протоны и электроны могут либо оказаться захваченными, либо покинуть эту область.

Частицы высоких энергий могут быть удержаны лишь сильным магнитным полем, т. е. во внутренних областях магнитосферы.

В околоземном пространстве можно выделить две торообразные области, расположенные в экваториальной плоскости примерно на расстоянии от 300 км до 6000 и от 12000 км до



Меридиональное сечение радиационного пояса Земли.

$L \sim 1 \div 3$  радиуса Земли - внутренняя часть пояса;

$L \sim 3,5-7$  радиуса Земли - внешняя часть.

40000 км. Обычно выделяют внутренний и внешний радиационные пояса Земли, пояс протонов малых энергий (пояс кольцевого тока) и зону квазизахвата частиц, или *авроральной* радиации (латинское название *полярных сияний*).

Внутренний радиационный пояс характеризуется наличием протонов высоких энергий (от 20 до 800 Мэв). Во внутреннем поясе присутствуют также электроны с энергиями от 20—40 кэв до 1 Мэв.

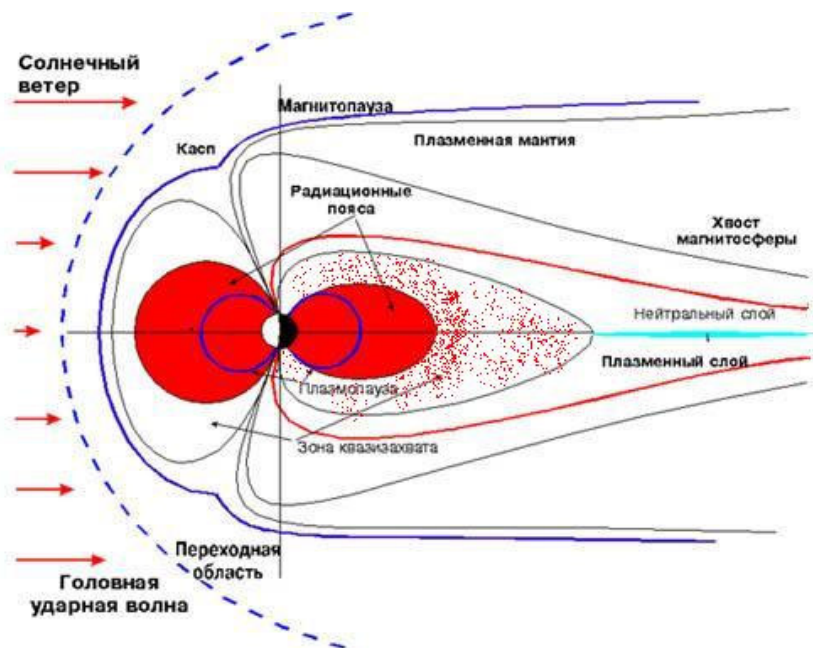
Внутренний пояс расположен вокруг Земли в экваториальных широтах. С внешней стороны этот пояс ограничен оболочкой с  $L \sim 2$  радиуса Земли, которая пересекается с поверхностью Земли на геомагнитных широтах  $\sim 45^\circ$ . Ближе всего к поверхности Земли (на

высоты до 200-300 км) внутренний пояс подходит вблизи Бразильской магнитной аномалии, где поле сильно ослаблено; над географическим экватором нижняя граница внутреннего пояса отстоит от Земли примерно на 600 км над Америкой и до 1600 км над Австралией. На нижней границе внутреннего пояса частицы, испытывая частые столкновения с и молекулами атмосферных газов, теряют свою энергию, рассеиваются и «поглощаются» атмосферой.

Для внешнего радиационного пояса Земли характерны электроны с энергиями 40-100 кэВ. Среднее время «жизни» частиц внешнего радиационного пояса Земли составляет  $10^5$ - $10^7$  сек. В периоды повышенной солнечной активности во внешнем поясе присутствуют также электроны больших энергий (до 1 МэВ и выше).

Пояс протонов малых энергий ( $E_p \sim 0,03$ —10 МэВ) простирается от  $L \sim 1,5$  радиуса Земли до  $L \sim 7$ —8 радиусов Земли. Зона квазизахвата, или авроральной радиации, расположена за внешним поясом, она имеет сложную пространственную структуру, обусловленную деформацией солнечным ветром (потокотом заряженных частиц от Солнца). Основной составляющей частиц зоны квазизахвата являются электроны и протоны с энергиями  $E < 100$  кэВ. Внешний пояс и пояс протонов малых энергий ближе всего (до высоты 200-300 км) подходит к Земле на широтах 50—60°. На широты выше 60° проецируется зона квазизахвата, совпадающая с областью максимальной частоты появления полярных сияний. В некоторые периоды отмечается существование узких поясов электронов высоких энергий ( $E_e \sim 5$  МэВ) на оболочках с  $L \sim 2,5$ —3,0 радиуса Земли.

Радиационные пояса испытывают различные временные вариации: расположенный ближе к Земле и более стабильный внутренний пояс - незначительные, внешний пояс - наиболее частые и сильные. Для внутреннего радиационного пояса Земли характерны небольшие вариации



ции в течение 11-летнего цикла солнечной активности. Внешний пояс заметно меняет свои границы и структуру даже при незначительных возмущениях. Пояс протонов малых энергий занимает в этом смысле промежуточное положение. Особенно сильные вариации радиационных поясов Земли претерпевают во время магнитных бурь. Сначала во внешнем поясе резко возрастает плотность потока частиц малых энергий и в то же время теряется заметная доля частиц больших энергий. Затем происходит захват и ускорение новых частиц, в результате которых в поясах появляются потоки частиц на расстояниях обычно более близких к Земле, чем в спокойных условиях. После фазы сжатия происходит медленное, постепенное возвращение радиационных поясов Земли к исходному состоянию. В периоды высокой солнечной активности бури происходят очень часто, так что эффекты от отдельных бурь накладываются друг на друга, и



максимум внешнего пояса в эти периоды располагается ближе к Земле, чем в периоды минимума солнечной активности.

Высыпание частиц из ловушки, в особенности из зоны квазизахвата (авроральной радиации), приводит к усилению ионизации ионосферы, а интенсивное высыпание - к полярным сияниям. Во время бурь происходит как накачка частиц в радиационный пояс Земли, так и сброс их в атмосферу Земли. Полярные сияния длятся все время, пока идут эти процессы, - иногда сутки и более.

Радиационные пояса Земли могут быть созданы также искусственным образом. Например, при взрыве ядерного устройства на больших высотах; при инъекции искусственно ускоренных частиц, например с помощью ускорителя на борту спутника; при распылении в околоземном пространстве радиоактивных веществ, продукты распада которых будут захвачены полем. Создание искусственных поясов при взрыве ядерных устройств было осуществлено в 1958 и в 1962 годах. Так, после американского ядерного взрыва (9 июля 1962) во внутренний пояс было инжестировано около  $10^{25}$  электронов с энергией  $\sim 1$  МэВ, что на два-три порядка превысило интенсивность потока электронов естественного происхождения. Остатки этих электронов наблюдались в поясах в течение почти 10-летнего периода.

Радиационные пояса Земли представляют собой серьезную опасность при длительных полетах в околоземном пространстве. Потоки протонов малых энергий могут вывести из строя *солнечные батареи* и вызвать помутнение тонких оптических покрытий. Длительное пребывание во внутреннем поясе может привести к *лучевому поражению* живых организмов внутри космического корабля под воздействием протонов высоких энергий.

#### Радиационные пояса планет

Благодаря наличию сильного магнитного поля, планеты-гиганты (Юпитер, Сатурн, Уран и Нептун) также обладают сильными радиационными поясами, напоминающими внешний радиационный пояс Земли.