

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ»

**А.Н. Паршаков**

# **КУРС ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ**

Допущено Научно-методическим советом  
по физике Министерства образования  
и науки Российской Федерации  
в качестве учебного пособия для студентов  
высших учебных заведений, обучающихся  
по техническим направлениям подготовки  
и специальностям

Издательство  
Пермского государственного технического университета  
2006

УДК 530.145 (075.8)

ББК 22.314я73

П18

**Рецензенты:**

кафедра теоретической физики и компьютерного моделирования  
Пермского государственного педагогического университета;

доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры теоретической физики  
Пермского государственного университета В.К. Хеннер

**Паршаков А.Н.**

П18 Курс лекций по квантовой физике: учеб. пособие /  
А.Н. Паршаков. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2006. –  
196 с.

ISBN 5-88151-585-4

В пособии изложены основные принципы и аппарат квантовой механики, рассмотрены макроскопические проявления квантовых законов проводимости твердых тел и их применение в электронной и измерительной технике. Пособие написано на основе курса лекций по квантовой физике, который читается автором студентам электротехнического факультета Пермского государственного технического университета в течение ряда лет. Изложение квантовой физики в техническом вузе связано с недостаточностью математической подготовки студентов первых курсов, поэтому особое внимание уделялось рассмотрению физических принципов квантовой физики.

Пособие содержит более 150 задач по основам квантовой физики, которые тесно связаны с основным текстом и часто являются его развитием и дополнением. К сложным задачам даны подробные указания и решения.

Предназначено для студентов электротехнических специальностей технических вузов, а также для преподавателей общей физики.

УДК 530.145 (075.8)

ББК 22.314я73

ISBN 5-88151-585-4

© ГОУ ВПО «Пермский государственный  
технический университет», 2006

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ .....</b>	<b>6</b>
<b>1. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ .....</b>	<b>7</b>
1.1. Гипотеза де Бройля. Волновые свойства вещества .....	7
1.2. Принцип неопределенности и его следствия .....	9
1.3. Волновая функция. Уравнение Шредингера.....	16
1.4. Принцип суперпозиции состояний.....	18
1.5. Операторный метод .....	20
Задачи .....	26
<b>2. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ БАРЬЕРЫ И ЯМЫ.....</b>	<b>34</b>
2.1. Движение свободной частицы .....	34
2.2. Прохождение частицы через потенциальный барьер.....	36
2.3. Проявления туннельного эффекта.....	39
2.4. Квантовая частица в бесконечно глубокой потенциальной яме.....	42
2.5. Квантовая частица в яме конечной глубины.....	45
2.6. Квантование в сферически симметричном силовом поле .....	49
Задачи .....	51
<b>3. ФИЗИКА АТОМОВ И МОЛЕКУЛ.....</b>	<b>62</b>
3.1. Гармонический осциллятор .....	62
3.2. Применение уравнения Шредингера к атому водорода ...	64
3.3. Пространственное квантование .....	66
3.4. Опыт Штерна и Герлаха. Спин электрона.....	68
3.5. Квантовые числа. Кратность вырождения энергетических уровней .....	70
3.6. Спектры излучений атома водорода .....	71
3.7. Спектры щелочных металлов .....	73
3.8. Мультиплетность спектров и спин электрона.....	74
3.9. Принцип Паули. Энергетические оболочки.....	76
3.10. Периодическая система элементов Менделеева .....	78
3.11. Механизмы образования молекул.....	80

3.12. Индуцированное излучение .....	81
3.13. Принцип усиления света с помощью вынужденного излучения.....	82
3.14. Лазеры .....	83
3.15. Лазеры для системы ПРО .....	85
Задачи .....	86
<b>4. КВАНТОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ .....</b>	<b>89</b>
4.1. Квантовая теория свободных электронов в металле .....	89
4.2. Распределение Ферми-Дирака. Фермионы.....	93
4.3. Фононы. Распределение Бозе-Эйнштейна.....	96
4.4. Принцип неразличимости квантовых частиц.....	99
Задачи .....	102
<b>5. ЗОННАЯ ТЕОРИЯ ПРОВОДИМОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ .....</b>	<b>104</b>
5.1. Типы связей в кристаллах .....	104
5.2. Теорема Блоха и зоны Бриллюэна.....	107
5.3. Движение электронов в кристаллической решетке.....	109
5.4. Рассеяние и захват электронов на нерегулярностях решетки.....	114
5.5. Динамика поведения электрона в решетке.....	117
5.6. Электрон в трехмерной решетке .....	119
5.7. Энергетические зоны в кристаллах .....	122
5.8. Электропроводность металлов .....	124
5.9. Сверхпроводимость .....	126
Задачи .....	128
<b>6. ПОЛУПРОВОДНИКИ.....</b>	<b>129</b>
6.1. Собственная проводимость полупроводников. Электроны и дырки.....	129
6.2. Примесная проводимость полупроводников .....	133
6.3. Работа выхода. Контактная разность потенциалов .....	136
6.4. Термоэлектрические явления.....	138
6.5. Контактные явления в полупроводниках .....	139
6.6. Полупроводниковый диод. Уравнение Шокли .....	141
6.7. Транзистор .....	144
Задачи .....	146

<b>7. МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ</b>	
<b>КВАНТОВЫХ ЗАКОНОВ .....</b>	<b>148</b>
7.1. Уравнение Шредингера в магнитном поле .....	148
7.2. Макроскопическое представление волновой функции...	150
7.3. Волновая функция для электронов при низких температурах .....	153
7.4. Квантование магнитного потока .....	154
7.5. Переходы Джозефсона .....	157
7.6. Джозефсоновская генерация.....	162
7.7. Сверхпроводящие квантовые интерферометры.....	164
7.8. Применение слабой сверхпроводимости.....	167
Задачи .....	168
<b>ОТВЕТЫ К ЗАДАЧАМ .....</b>	<b>169</b>
<b>СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....</b>	<b>195</b>

## ВВЕДЕНИЕ

Раздел квантовой физики является одним из наиболее сложных разделов, завершающих изучение курса общей физики в техническом вузе. Современная квантовая физика в силу своей специфики предполагает, прежде всего, хорошее владение математическим аппаратом (дифференциальные уравнения, специальные функции и др.). Поэтому главной задачей данного курса лекций является создание «моста» между математическим формализмом квантовой механики и ее конкретными практическими проявлениями. Основное внимание уделено физической стороне рассматриваемых вопросов.

В соответствии с образовательным стандартом для студентов электротехнических специальностей по физике (раздел «Квантовая физика») рассмотрены основные принципы и постулаты квантовой механики, задачи, связанные с потенциальными барьерами и ямами, физика атомов и молекул, статистика квантовых систем частиц. Изложение сопровождается практическими примерами проявления квантовых законов.

Так как пособие ориентировано, прежде всего, на студентов электротехнических специальностей, то основное внимание уделено вопросам квантовой проводимости твердых тел, главным образом физике полупроводников. Рассмотрены макроскопические проявления квантовых законов – квантование магнитного потока и эффект Джозефсона, нашедший широкое применение в измерительной и электронной технике, биологии и медицине.

К каждой рассматриваемой теме прилагаются как чисто учебные задачи, так и задачи повышенного уровня сложности, предполагающие вдумчивый анализ изучаемого материала. Задачи тесно связаны с основным текстом и часто являются его продолжением и дополнением; к самым сложным даны подробные указания и решения.

# 1. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

## 1.1. ГИПОТЕЗА ДЕ БРОЙЛЯ. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА

В 1923 г. стало почти ясно, что теория Бора и старая теория квантов – лишь промежуточное звено между классическими представлениями и какими-то новыми взглядами, позволяющими глубже исследовать квантовые явления. Открытый к этому времени эффект Комптона и изучение фотоэффекта рентгеновских лучей лишний раз подтвердили представления Эйнштейна о световых квантах. Следовательно, с еще большей остротой встала дилемма: что такое свет – волны или частицы? Соотношение Эйнштейна между частотой и энергией, введенное им в теории фотонов, ясно показало, что этот дуализм излучения неразрывно связан с самим существованием квантов. Но тогда почти сам собой возникает вопрос: поскольку свойства электрона в стационарном состоянии атома описываются с помощью постоянной Планка, нельзя ли предположить, что и электрон также двойственен, как и свет? И в 1924 году Луи де Бройль выдвинул гипотезу, что дуализм не является особенностью одних лишь оптических явлений, а присущ также и частицам вещества. По его идее, частицы вещества также должны проявлять волновые свойства, т.е. движение электрона или другой микрочастицы связано с некоторым волновым процессом, длина волны которого должна быть равна

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{m\vartheta},$$

а частота  $\omega = E/\hbar$ , где  $p = m\vartheta$  – импульс частицы. Иначе говоря, поведение частиц должно подчиняться также и волновым законам.

Экспериментальное подтверждение идеи де Бройля было осуществлено Дэвиссоном и Джермером в ходе опытов по отражению электронов от кристаллов никеля.

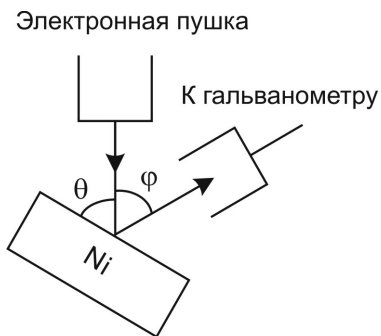


Рис. 1.1

Узкий пучок моноэнергетических электронов (рис. 1.1) направлялся на поверхность монокристалла никеля. Отраженные электроны улавливались цилиндрическим электродом, присоединенным к гальванометру. В опытах изменялась скорость электронов и угол  $\phi$ . И оказалось, что максимальное рассеяние наблюдалось при некотором угле  $\phi_0$  и определенной скорости  $\vartheta_0$ . Все это было очень

похоже на дифракцию рентгеновских лучей. Максимальное отражение рентгеновского излучения должно наблюдаться в направлении, подчиняющемся формуле Вульфа-Брэггов  $2d \sin \theta = k\lambda$ , где  $d$  – расстояние между атомными плоскостями, которое было известно из рентгенографических исследований. Рассчитанное по формуле Вульфа-Брэггов (при известных значениях  $\theta$  и  $d$ ) значение  $\lambda$  равнялось  $1,65 \cdot 10^{-10}$  м. Вычисленное значение  $\lambda$  по формуле де Бройля равно  $1,67 \cdot 10^{-10}$  м! Совпадение было настолько полным, что опыты Дэвиссона и Джермера следует признать блестящим подтверждением гипотезы де Бройля (поразительный факт: Дэвиссон наблюдал подобное явление за три года до появления работы де Бройля, но не смог правильно истолковать полученные экспериментальные данные).

В дальнейшем были проведены опыты по дифракции электронов на тонкой металлической фольге (Томсон, Тартаковский), которые ясно свидетельствовали, что дифракция микрочастиц абсолютно тождественна дифракции рентгеновского излучения. Существовало предположение, что волновые свойства частицы проявляют только в достаточно интенсивных пучках (как «коллективный эффект»), но опыты по дифракции на одиночных электронах показали, что волновые свойства присущи отдельной микрочастице. Каждая микрочастица сочетает в себе свойства и частицы, и волны; однако она не ведет себя ни как волна, ни как частица. Отличие частицы от волны заключается в том, что частица всегда обнаруживается как неделимое целое. Никто никогда



не наблюдал, например, пол-электрона. В то же время волну можно разделить на части и воспринимать затем каждую часть в отдельности, например, при интерференции света.

Своеобразие свойств микрочастиц отчетливо обнаруживается в следующем мысленном эксперименте по дифракции электронов на двух щелях (позднее этот опыт был проведен в реальных условиях).

На преграду с двумя узкими щелями (рис. 1.2) направляется параллельный пучок моноэнергетических электронов. За преградой размещается для регистрации места попадания электронов фотопластинка ( $\Phi_{пл}$ ). При открытой только первой щели распределение попаданий электронов на фотопластинку имеет вид кривой 1. При открытой второй щели распределение имеет вид 2. Если же открыть обе

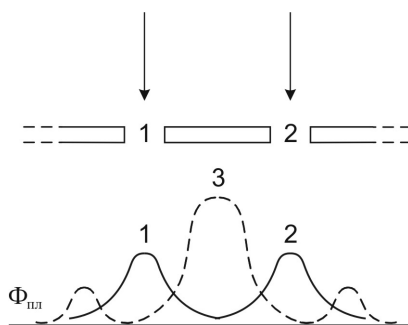


Рис. 1.2

щели одновременно, то распределение попадания электронов не является простой суммой кривых 1 и 2, а отображается кривой 3. Эта ситуация отнюдь не эквивалентна наложению первых двух. Она аналогична картине, получающейся при интерференции двух когерентных световых волн. Данная ситуация свидетельствует о том, что на движение каждого электрона влияют сразу оба отверстия. То есть электрон, каким-то непостижимым образом «знает», открыто одно отверстие или оба! Отсюда автоматически следует вывод о том, что к нему неприменимо понятие траектории (мы не можем сказать, через какую щель прошел электрон).

## 1.2. ПРИНЦИП НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ И ЕГО СЛЕДСТВИЯ

То обстоятельство, что в квантовой механике не существует понятия траектории, составляет содержание так называемого «принципа неопределенности», сформулированного в 1927 г. Гейзенбергом. Если пытаться измерить одновременно координату и импульс микрочастицы, то чем с большей точностью известно

положение частицы, тем больше неопределенность в значении импульса. С математической точки зрения данное положение обычно записывают в следующем виде:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar,$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar,$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar,$$

где  $\Delta x$  – неопределенность координаты  $x$ ,  $\Delta p_x$  – неопределенность импульса в направлении оси  $x$  (аналогично для других направлений). Подобное же соотношение существует и для энергии:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar,$$

которое означает, что чем короче время существования какого-то состояния или время, отведенное для его наблюдения, тем с меньшей определенностью можно говорить об энергии этого состояния. Если состояние стационарно, то оно может существовать бесконечно долго. Иногда это соотношение трактуют таким образом: для измерения энергии с точностью  $\Delta E$  необходимо время  $\Delta t \geq \hbar / \Delta E$ .

Соотношение неопределенностей не связано с несовершенством измерительных приборов, а глубоко обусловлено самой природой вещей. Если бы оказалось возможным преодолеть это ограничение, то рухнуло бы все здание квантовой механики.

Проанализируем в связи с этим мысленный эксперимент по одновременному определению координаты и импульса электро-

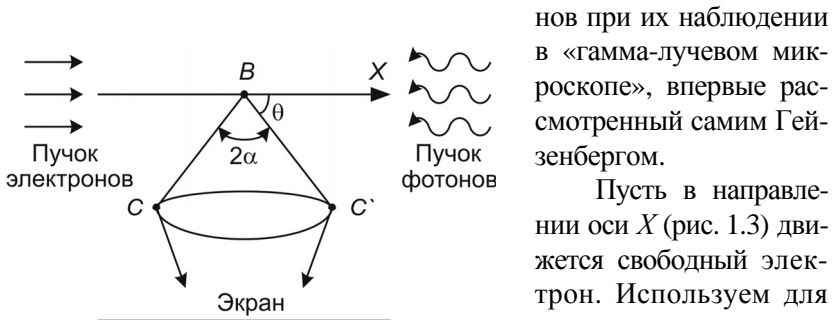


Рис. 1.3

нов при их наблюдении в «гамма-лучевом микроскопе», впервые рассмотренный самим Гейзенбергом.

Пусть в направлении оси  $X$  (рис. 1.3) движется свободный электрон. Используем для определения координаты электрона микро-

скоп. Поскольку требуется высокая точность, будем вести наблюдение с помощью коротких электромагнитных волн. При рассеянии фотонов на электроне в точке  $B$  пучок рассеянных фотонов попадает на экран через объектив  $CC'$ . В этом случае изображением светящейся точки (электрона) в плоскости изображения является дифракционная картина, состоящая из концентрических колец, окружающих центральный светлый дифракционный кружок (кружок Эйри). На него приходится около 84 % энергии света. Этот кружок и будет изображением светящейся точки (электрона). В волновой оптике доказывается, что минимальное разрешаемое расстояние (определяемое пределом разрешения микроскопа) равно

$$l_{\min} = 0,61 \frac{\lambda}{\sin \alpha},$$

где  $2\alpha$  – угол, под которым виден объектив из положения электрона (так называемая апертура),  $\lambda$  – длина волны света. Этот предел разрешения обусловлен волновой природой света и не может быть превзойден никакими техническими усовершенствованиями микроскопа. Значение  $l_{\min}$  и можно принять за неопределенность координаты электрона  $\Delta x$ . Значение  $\sin \alpha \approx d/2f$ , где  $d$  – диаметр объектива,  $f$  – расстояние от электрона до объектива. Таким образом, неопределенность координаты электрона будет порядка  $\Delta x \approx \lambda f / d$ .

При рассеянии фотона на электроне происходит изменение состояния самого электрона. Если электроны свободны, то, согласно теории эффекта Комптона, импульс, теряемый световым квантом при рассеянии, передается электрону. Таким образом, если квант света с частотой  $\omega$  и импульсом  $\hbar\omega/c$  рассеивается на угол  $\theta$ , электрону передается импульс, равный

$$p_x \approx \frac{\hbar\omega}{c}(1 - \cos \theta).$$

Следовательно, нельзя наблюдать электрон, не возмущая его. Более того, величина этого возмущения неизвестна, так как из-за конечной апертуры объектива неизвестен сам угол  $\theta$  (этот угол может лежать в пределах от  $XBC$  до  $XBC'$ ). Значит, для

угла  $\theta$  есть неопределенность порядка  $d / f$ , а поскольку  $\theta \approx 90^\circ$ , неопределенность импульса, переданного электрону, будет порядка

$$\Delta p \approx \frac{\hbar \omega}{c} \frac{d}{f}.$$

Отсюда получаем

$$\Delta p \Delta x \approx \frac{\hbar \omega}{c} \frac{d}{f} \frac{\lambda f}{d} \approx 2\pi\hbar,$$

что и следует из соотношения неопределенностей.

Отметим некоторые выводы, вытекающие из соотношения неопределенностей.

1. Измерения в квантовой области принципиально отличаются от классических измерений. Конечно, и те и другие измерения сопровождаются некоторой ошибкой. Однако в классической физике всегда предполагалось, что путем улучшения методики и техники измерений ошибки могут быть сделаны сколь угодно малыми. В квантовой же механике существует предел точности измерений, который лежит в природе вещей и не может быть преодолен никаким ухищрениями. Соотношения неопределенностей Гейзенберга и устанавливают один из таких пределов. Взаимодействие между макроскопическим прибором и микрочастицей во время измерения принципиально нельзя сделать сколь угодно малым. Если измеряется, например, координата частицы, то измерение неизбежно приводит к неустранимому неконтролируемому искажению первоначального состояния частицы, а следовательно, и к неопределенности импульса при последующем измерении. То же самое происходит, если поменять местами порядок измерения координаты и импульса частицы.

2. Невозможно реализовать состояние, в котором частица находится в полном покое.

3. В квантовой механике теряет смысл деление полной энергии на кинетическую и потенциальную. Одна из них зависит от импульсов, а другая от координат. А эти переменные не могут иметь одновременно определенные значения. Энергия  $E$  должна определяться и измеряться лишь как полная энергия, без деления на кинетическую и потенциальную.

Соотношение неопределенности является одним из фундаментальных положений квантовой механики. Оно, например, позволяет объяснить, почему электрон не падает на ядро, более того, оценить даже размеры простейшего атома и его минимальную энергию. Примем для оценки неопределенность положения электрона в атоме водорода порядка размеров атома и неопределенность импульса порядка самого импульса:  $\Delta r \approx r$  и  $\Delta p \approx p$ . Тогда в силу соотношения неопределенности имеем  $rp \approx \hbar$ . В гауссовой системе единиц энергия электрона в атоме водорода равна

$$E = \frac{m\mathfrak{G}^2}{2} - \frac{e^2}{r} = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Найдем размеры атома при минимальной энергии. Для этого продифференцируем энергию по расстоянию и положим производную равной нулю:

$$-\frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0.$$

Отсюда сразу находим выражение для боровского радиуса:

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2},$$

и для минимальной энергии электрона в атоме водорода

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 - e^2 \frac{me^2}{\hbar^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}.$$

Причем мы получили абсолютно точные значения (случайность!).

Докажем теперь, что электрон не может находиться внутри атомного ядра. Если электрон может находиться в области порядка размеров ядра ( $\Delta x \approx 10^{-15}$  м), то неопределенность импульса будет порядка

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx 197 \text{ МэВ/с}.$$

Оценим теперь его кинетическую энергию. На всякий случай воспользуемся релятивистской формулой для кинетической энергии:

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 \approx 267 \text{ МэВ}$$

(мы не ошиблись, применив релятивистскую формулу, поскольку полученное значение более чем в 500 раз превосходит энергию покоя электрона). Мы не знаем в природе сил, величина которых обеспечила бы связь электронов, обладающих столь большой энергией, с нуклонами ядра (электростатическая потенциальная энергия электрона на поверхности ядра составляет лишь 10 МэВ).

Представление о классическом движении электрона по орбитам также противоречит соотношению неопределенностей. Чтобы такое представление имело смысл, необходимо выполнение соотношения  $\Delta r \ll r_0$ , где  $r_0 = \hbar^2 / me^2$  – радиус первой боровской орбиты, а  $\Delta r$  – его неопределенность. Соответствующая неопределенность в радиальном импульсе будет:

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta r} \gg \frac{\hbar}{r_0} = \frac{me^2}{\hbar},$$

что равно самому импульсу электрона  $p = me^2 / \hbar$ . Это и означает, что бессмысленно говорить о движении электрона по орбитам внутри атома.

Посмотрим теперь на колебания атомов в твердых телах с точки зрения принципа неопределенности. Обычно такие колебания связаны с тепловым движением атомов. Чем выше температура, тем сильнее колебания и тем больше амплитуда этих колебаний. При понижении температуры уменьшается и амплитуда этих колебаний. И при нулевой температуре, с точки зрения классической физики, амплитуда должна быть равна нулю. А что же происходит на самом деле? Уменьшение амплитуды колебаний приводит к уменьшению области локализации частицы, и соответственно, в силу принципа неопределенности, начинает расти импульс и энергия частицы. То есть попытка остановить частицу безуспешна! И даже при абсолютном нуле температуры атомы в твердом теле совершают колебания – их называют нулевыми колебаниями.

Оценим энергию этих колебаний, принимая атом за гармонический осциллятор. Энергия гармонического осциллятора массой  $m$  и частотой  $\omega$  связана с амплитудой колебаний  $A$  соотношением:

$$E = \frac{m\omega^2 A^2}{2}.$$

Данное соотношение в сочетании с принципом неопределенности дает своеобразную связь амплитуды колебаний и энергии частицы. Чем меньше энергия, тем меньше амплитуда (область локализации частицы), тем больше минимальный импульс частицы, а это, соответственно, приводит к росту энергии. Минимальная энергия, которой может обладать частица, составляет

$$E_0 = \frac{p_0^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{mA^2} \approx \frac{\hbar^2 m \omega^2}{m E_0}$$

(при этом мы воспользовались соотношением  $p_0 A \approx \hbar$ ).

Из последнего соотношения получаем  $E_0 \approx \hbar\omega$  (точный расчет дает  $E_0 = \hbar\omega/2$ ). Полученный результат говорит о том, что энергия колебаний максимальна у легких атомов, у которых большая частота  $\omega$ .

Самое яркое проявление нулевых колебаний – жидкость, которая не замерзает при  $T = 0$  К. Ясно, что жидкость не замерзает, если кинетической энергии колебаний атомов достаточно для того, чтобы разрушить кристаллическую решетку. При этом совершенно неважно происхождение кинетической энергии – связана ли она с тепловым движением атомов или с нулевыми квантовыми колебаниями. Наиболее вероятные кандидаты в незамерзающие жидкости – водород и гелий (максимальная энергия нулевых колебаний). Но гелий – инертный газ, с очень слабым взаимодействием между атомами. И кинетической энергии нулевых колебаний достаточно для расплавления кристаллической решетки. Вот почему гелий не замерзает даже при нулевой температуре при нормальном давлении (при давлении 25 атмосфер гелий все-таки замерзает!).

Иногда соотношение неопределенности получает следующее толкование: «на самом деле» частица имеет точное значе-

ние координаты и импульса, однако вмешательство прибора «портит» их значения. Такое истолкование является совершенно неверным, т.к. противоречит наблюдаемой на опыте дифракции микрочастиц.

### 1.3. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

В основу математического аппарата квантовой механики положен тот факт, что каждое состояние системы микрочастиц может быть описано некоторой функцией координат и времени  $\psi(x, y, z, t)$ . Ее называют волновой функцией (пси-функцией). В общем случае эта функция является комплексной. Физический смысл ее заключается в том, что квадрат ее модуля определяет вероятность обнаружить частицу в пределах объема  $dV$ :  $dP = A|\psi|^2 dV$ , где  $A$  – некоторый коэффициент пропорциональ-

ности, который находится из условия  $A \int_V |\psi|^2 dV = A \int_V \psi \psi^* dV = 1$  (знак  $*$  означает комплексное сопряжение). Это позволяет переопределить пси-функцию таким образом, чтобы было выполнено условие нормировки для самой волновой функции:  $\int_V |\psi|^2 dV = 1$ .

Из смысла пси-функции следует, что квантовая механика имеет статистический характер. С помощью волновой функции можно только предсказать, с какой вероятностью частица может быть обнаружена в данном месте пространства. Сама волновая функция является решением дифференциального уравнения, которое впервые получил Шредингер в 1926 г. Уравнение Шредингера является основным уравнением квантовой механики и не может быть выведено из других соотношений. Его следует рассматривать как исходное основное предположение, справедливость которого доказывается тем, что вытекающие из него следствия точно согласуются с опытными фактами. Само уравнение выглядит следующим образом:

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



где  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  – оператор Лапласа,  $m$  – масса частицы,

$U(x, y, z, t)$  – функция, градиент которой, взятый со знаком минус, определяет силу, действующую на частицу. Если функция  $U$  не зависит от времени, то она имеет смысл потенциальной энергии.

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то  $U$  не зависит явно от времени, и в этом случае решение уравнения Шредингера можно представить в виде произведения двух множителей, один из которых зависит только от времени, другой – от координат:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

где  $E$  – полная энергия частицы (в случае стационарных полей остается постоянной). После подстановки этого выражения в исходное уравнение Шредингера и сокращения на  $\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$  получаем уравнение Шредингера для стационарных состояний:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = E \psi .$$

В дальнейшем будем иметь дело в основном с этим уравнением. Иначе это уравнение можно переписать в следующем виде:

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

где под  $U$  будем понимать потенциальную энергию частицы. Из физического смысла пси-функции следует, что она должна быть однозначной, непрерывной и конечной – т.е. отвечать стандартным условиям. Иногда встречаются ситуации, когда имеет смысл не квадрат модуля волновой функции, а отношение квадратов модулей волновых функций, взятых в разных точках пространства. Это отношение дает относительную вероятность обнаружения частицы в разных точках пространства.

Известно, что уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет решения не при всех значениях параметра  $E$ ,

а только при некоторых, называемых собственными значениями энергии. Тогда соответствующие им значения  $\psi(x, y, z)$  – называются собственными функциями.

## 1.4. ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ СОСТОЯНИЙ

Итак, непосредственный физический смысл связывается не с самой функцией  $\psi$ , а с квадратом ее модуля  $\psi\psi^*$ . Почему же в квантовой механике рассматривается волновая функция  $\psi$ , а не непосредственно наблюдаемая величина  $\psi\psi^*$ ? Это необходимо для истолкования волновых свойств вещества – интерференции и дифракции, которые отражают объективные, реально наблюдаемые волновые свойства материи. Здесь дело обстоит точно так же, как и во всякой волновой теории. Эта теория принимает справедливость принципа суперпозиции самих волновых полей, а не их интенсивностей, пропорциональных квадрату полей, что позволяет включить в теорию явления интерференции и дифракции. Так и в квантовой механике принимается в качестве одного из основных постулатов принцип суперпозиции волновых функций. Оправданием такого принципа является согласие с опытом вытекающих из данного принципа следствий. Суть данного принципа заключается в следующем. Если  $\psi_1$  и  $\psi_2$  – какие-либо два решения уравнения Шредингера, то и всякая линейная их комбинация  $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$  с постоянными и в общем случае комплексными коэффициентами  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  также является решением уравнения Шредингера. Во-вторых, если волновые функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$  описывают какие-либо два состояния системы, то и линейная их комбинация  $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$  также описывает какое-то состояние этой же системы.

Рассмотрим некоторую физическую величину  $f$ , характеризующую состояние квантовой системы. Значения, которые может принимать данная физическая величина, называют в квантовой механике ее собственными значениями, а об их совокупности говорят как о спектре собственных значений данной величины.

В квантовой механике, как и в классической, существуют физические величины (например, координаты), собственные значения которых заполняют непрерывный ряд. В таких случаях говорят о непрерывном спектре собственных значений. Наряду

с такими величинами в квантовой механике существуют величины, собственные значения которых образуют некоторый дискретный набор; в таких случаях говорят о дискретном спектре. Будем полагать для простоты, что рассматриваемая величина  $f$  обладает дискретным спектром, и ее собственные значения обозначим как  $f_n$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ). Обозначим волновую функцию системы в состоянии, в котором величина  $f$  имеет значение  $f_n$  как  $\psi_n$  – собственные функции величины  $f$ . Каждая из этих функций предполагается нормированной:

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

Если система находится в некотором произвольном состоянии с волновой функцией  $\psi$ , то произведенное над ней измерение величины  $f$  даст одно из собственных значений  $f_n$ . В соответствии с принципом суперпозиции волновую функцию произвольного состояния можно представить в виде ряда:

$$\psi = \sum C_n \psi_n, \quad (1.1)$$

где  $C_n$  – некоторые не зависящие от координат коэффициенты (для состояний, изменяющихся со временем, коэффициенты  $C_n$  зависят от времени). Последнее соотношение означает, что всякая волновая функция может быть разложена по собственным функциям любой физической величины. В квантовой механике доказывается, что квадрат модуля  $|C_n|^2$  каждого из коэффициентов разложения (1.1) определяет вероятность соответствующего значения  $f_n$  величины  $f$  в состоянии с волновой функцией  $\psi$ . Сумма вероятностей всех возможных значений  $f_n$ , очевидно, должна быть равна единице:

$$\sum |C_n|^2 = 1 \quad (1.2)$$

(если бы функция  $\psi$  не была нормированной, то не имело бы места и соотношение (1.2)).

Кроме того, сами коэффициенты ряда (1.1) могут быть найдены по формуле:

$$C_n = \int \psi \psi_n^* dx. \quad (1.3)$$

С учетом разложения (1.1) можно увидеть, что собственные функции должны удовлетворять условиям:

$$\int \psi_m \psi_n^* dx = \delta_{mn}, \quad (1.4)$$

где  $\delta_{nn} = 1$  при  $n = m$  и  $\delta_{nm} = 0$  при  $n \neq m$ . Если говорить точно, то условие (1.4) выполняется только для невырожденного спектра энергии. Спектр считается невырожденным, если каждому значению энергии соответствует одна волновая функция. О функциях, подчиняющихся условию (1.4), говорят как об ортогональных. Таким образом, совокупность собственных функций  $\psi_n$  образует полную систему нормированных и взаимно ортогональных функций, или, как говорят для краткости, систему ортонормированных функций.

## 1.5. ОПЕРАТОРНЫЙ МЕТОД

Для придания законченной формы связи символов квантовой механики с реально наблюдаемыми величинами применяют так называемый операторный метод.

Под оператором понимают правило, посредством которого одной функции –  $\varphi$  сопоставляется другая функция –  $f$ . Символически это записывают в виде:

$$f = \hat{Q}\varphi,$$

где  $\hat{Q}$  – символическое обозначение оператора. Приведем примеры операторов:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \text{оператор Лапласа (лапласиан)},$$

$$\nabla = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} - \text{оператор «набла» и др.}$$

В простейшем случае оператор представляет собой умножение исходной функции  $\varphi$  на некоторую другую  $Q$

$$f = Q\varphi.$$

Обратимся к уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi .$$

Перепишем его в виде

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U \right] \psi = E\psi .$$

С использованием понятия оператора уравнение Шредингера можно представить следующим образом:

$$\hat{H}\psi = E\psi ,$$

где  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$  называют оператором Гамильтона (гамильтониан) – это оператор энергии,  $E$  – собственное значение оператора Гамильтона – энергия системы.

Операторы можно сопоставить и другим физическим величинам. Существуют операторы координат, импульса, момента импульса и др.

Для любой переменной  $q$  можно записать соотношение, аналогичное уравнению Шредингера:

$$\hat{Q}\psi = q\psi ,$$

где  $\hat{Q}$  – оператор, сопоставляемый переменной  $q$ ,  $q$  – собственное значение данной переменной.

Существует несколько иной путь определения операторов в квантовой механике. Для этого введем понятие о среднем значении  $\langle f \rangle$  величины  $f$  в состоянии, характеризующемся волновой функцией  $\psi$ . Соответственно обычному определению средних значений, определим  $\langle f \rangle$  как сумму всех собственных значений  $f_n$  данной величины, умноженных каждое на соответствующую вероятность  $|C_n|^2$ :

$$\langle f \rangle = \sum f_n |C_n|^2 . \quad (1.5)$$

Здесь величины  $C_n$  являются коэффициентами разложения волновой функции в ряд по собственным волновым функциям  $\psi_n$ , соответствующим значениям  $f_n$ .

Для того чтобы в (1.5) входили не коэффициенты  $C_n$  разложения функции  $\psi$ , а сама эта функция, введем некоторый математический оператор  $\hat{f}$ , который определим так, чтобы интеграл от произведения  $\hat{f}\psi$  на  $\psi^*$  был бы равен среднему значению  $\langle f \rangle$ :

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

Для понимания правил построения операторов рассмотрим задачу определения среднего значения координаты какой-либо частицы. Предположим, что производится многократное измерение координаты  $x$  в одинаковых макроскопических условиях. Тогда состояние частицы в этих опытах можно характеризовать волновой функцией  $\psi(x)$ . Среднее значение координаты, которое будет найдено в результате измерений, можно представить в виде

$$\langle x \rangle = \int x \psi^* \psi dx,$$

так как  $\psi^* \psi dx$  дает вероятность того, что частица может быть обнаружена в интервале от  $x$  до  $x + dx$ . При этом предполагается выполнение условия нормировки:

$$\int \psi^* \psi dx = 1.$$

Запишем выражение для  $\langle x \rangle$  иначе:

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

где  $\hat{x}$  – оператор координаты, равный просто  $x$ . Совершенно аналогично вычисляется среднее значение любой функции координат:

$$\langle f(x) \rangle = \int \psi^* \hat{f} \psi dx,$$

где  $\hat{f}$  рассматривается как оператор.

Квантовая механика распространяет полученные результаты на любые физические величины, являющиеся функциями координат и импульсов:

$$\langle F(x, p) \rangle = \int \psi^*(x) \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) \psi(x) dx,$$

где  $\hat{F}(\hat{x}, \hat{p})$  – соответствующий функции  $F(x, p)$  оператор,  $\hat{x}$  – оператор координаты,  $\hat{p}$  – оператор импульса.

Оператором координаты, как мы уже знаем, является сама координата

$$\hat{x} = x .$$

Приведем без вывода выражение для оператора импульса

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} .$$

Собственные значения оператора импульса можно найти из уравнения

$$\hat{p}_x \psi = p_x \psi ,$$

или

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi . \quad (1.6)$$

В качестве примера найдем собственные функции оператора импульса для одномерного движения ( $p_x = p$ ). Легко увидеть, что решением уравнения (1.6) является выражение

$$\psi(x, t) = C(t) \exp(ipx / \hbar) = C(t) \exp(ikx) , \quad (1.7)$$

где  $k$  – волновое число,  $k = 2\pi / \lambda$  (в обычной механике) или  $k = p / \hbar$ ,  $C(t)$  – некоторая функция времени. Для ее определения вспомним, что общее решение нестационарного уравнения Шредингера имеет вид:

$$\psi(x, t) = \psi(x) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) = \psi(x) \exp(-i\omega t) .$$

Сравнивая это выражение с уравнением (1.7), видим, что:

$$C(t) = \text{const} \cdot \exp(-i\omega t) ,$$

где  $\omega$  – частота волны де Бройля. Тогда получаем:

$$\psi = \text{const} \cdot \exp[i(kx - \omega t)] ,$$

т.е. собственными функциями оператора импульса являются плоские волны де Бройля. Спектр собственных значений оператора

импульса  $\hat{p}_x$  непрерывен, так как вероятность обнаружить какое-либо значение импульса представляет собой постоянную величину, не зависящую ни от времени, ни от координат. Для подтверждения этого рассчитаем среднее значение проекции импульса:

$$\begin{aligned}\langle p_x \rangle &= \int \psi^* \hat{p}_x \psi dx = \int \exp[-i(kx - \omega t)] \left\{ -i\hbar \frac{d}{dx} \exp(ikx - i\omega t) \right\} dx = \\ &= \hbar k \int \psi^* \psi dx = \hbar k.\end{aligned}$$

Оператор момента импульса (точнее, проекции момента импульса на ось Z) определяется выражением:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

здесь  $\varphi$  – азимутальный угол сферической системы координат, характеризующий вращение вокруг оси Z (рис. 1.4). Собственные значения  $\hat{L}_z$  находятся из уравнения

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

или

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi.$$

К этому уравнению мы еще вернемся дальше.

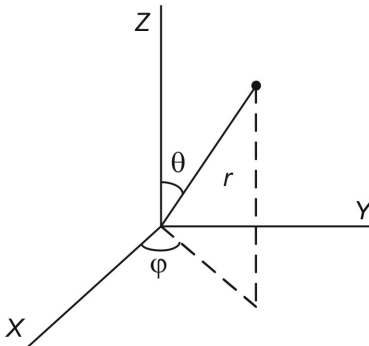


Рис. 1.4

Обсудим теперь некоторые общие свойства операторов, применяемых в квантовой механике. Все операторы являются линейными:

$$\hat{f}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{f}\psi_1 + \hat{f}\psi_2.$$

Это отражает принцип суперпозиции. Кроме того

$$\hat{f}(a\psi) = a\hat{f}\psi,$$

где  $a$  – произвольная постоянная.



Если рассматривается одновременное действие двух операторов, то в общем случае результат их действия зависит от порядка их применения: либо  $\hat{f}\hat{g}\psi$ , либо  $\hat{g}\hat{f}\psi$ . И если результат этих действий одинаков, то такие операторы называются коммутирующими. С физической точки зрения это отражает тот факт, что собственные значения этих операторов  $f$  и  $g$  могут одновременно иметь определенное значение (одновременно измеримы) и наоборот. Рассмотрим для примера операторы импульса  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  и координаты  $\hat{x} = x$ . Применим их к волновой функции в разной последовательности:

$$(\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x)\psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar \psi,$$

т.е.  $\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x = -i\hbar$ . А это означает, что одновременное знание  $p_x$  и  $x$  невозможно – в этом состоит соотношение неопределенности Гейзенберга.

В заключение рассмотрим некоторое другое представление уравнения Шредингера, которое пригодится нам в будущем.

Эволюция квантовомеханической системы во времени определяется волновой функцией  $\psi$ , которая является решением уравнения:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (1.8)$$

где  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона рассматриваемой системы. Если эта система может находиться только в дискретных состояниях  $\psi_\alpha$  ( $\alpha$  – набор индексов, характеризующих данное дискретное состояние), то волновую функцию системы, как уже говорилось ранее, можно разложить по полной системе ортонормированных функций  $\{\psi_\alpha\}$ :

$$\psi(t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(t) \psi_{\alpha}.$$

Подставим это разложение в уравнение (1.8):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum C_{\alpha}(t) \psi_{\alpha} = \hat{H} (\sum C_{\alpha}(t) \psi_{\alpha}). \quad (1.9)$$

Умножим соотношение (1.9) на  $\psi_\beta^*$  и проинтегрируем по всей области изменения  $x$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_\alpha \int \psi_\beta^* C_\alpha(t) \psi_\alpha dx = \sum_\alpha \int \psi_\beta^* \hat{H} (C_\alpha \psi_\alpha) dx.$$

С учетом взаимной ортогональности и условий нормировки приходим к уравнению:

$$i\hbar \frac{\partial C_\beta}{\partial t} = \sum_\alpha H_{\beta\alpha} C_\alpha, \quad (1.10)$$

где

$$H_{\beta\alpha} = \int \psi_\beta^* \hat{H} \psi_\alpha dx.$$

Очевидно, что  $H_{\beta\beta}$  – это энергия системы в состоянии  $\psi_\beta$ , а  $H_{\beta\alpha}$  – матричный элемент, характеризующий вероятность перехода системы из состояния  $\psi_\alpha$  в состояние  $\psi_\beta$ . Коэффициент  $C_\alpha(t)$  представляет собой амплитуду состояния  $\psi_\alpha$ , а  $|C_\alpha|^2$  – вероятность найти систему в состоянии  $\psi_\alpha$ .

## ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ

### «ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ»

1.1. При увеличении энергии электрона на  $\Delta E = 200$  эВ его дебройлевская длина волны изменилась в  $\eta = 2,0$  раза. Найти первоначальную длину волны электрона.

1.2. Найти среднюю длину волны де Бройля теплового нейтрона, т.е. нейтрона, находящегося в тепловом равновесии с окружающей средой, при комнатной температуре  $T = 300$  К.

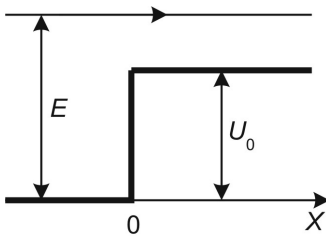


Рис. 1.5

1.3. Частица движется слева в одномерном потенциальном поле, показанном на рис. 1.5. Левее барьера, высота которого  $U_0 = 15$  эВ, кинетическая энергия частицы  $E = 20$  эВ. Как и во сколько раз изменится дебройлевская длина волны частицы после прохождения через барьер?

1.4. Определить кинетическую энергию протона, длина волны которого такая же, как у  $\alpha$ -частицы, движущейся в магнитном поле с заданным значением  $B\rho = 25 \cdot 10^{-4}$  Тл·см ( $B$  – магнитная индукция,  $\rho$  – радиус кривизны траектории).

1.5. Какую дополнительную энергию необходимо сообщить электрону с импульсом 15 кэВ/с, чтобы его длина волны стала равной 50 пм ( $c$  – скорость света)?

1.6. Протон с длиной волны  $\lambda = 1,7$  пм упруго рассеялся под углом  $90^\circ$  на первоначально покоившейся частице с массой в  $n = 4,0$  раза большей массы протона. Определить длину волны рассеянного протона.

1.7. Нейтрон с кинетической энергией  $E = 0,25$  эВ испытал упругое соударение с первоначально покоившимся ядром атома  $^4\text{He}$ . Найти длины волн обеих частиц в их Ц-системе (системе отсчета, покоящейся относительно центра инерции) до и после соударения.

1.8. Два атома,  $^1\text{H}$  и  $^4\text{He}$ , с дебройлевской длиной волны  $\lambda = 60$  пм, движутся в одном направлении. Найти их длины волн в Ц-системе.

1.9. Две одинаковые частицы движутся с нерелятивистскими скоростями перпендикулярно друг другу. Длины волн частиц равны соответственно  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Найти длину волны каждой частицы в их Ц-системе.

1.10. Релятивистская частица массой  $m$  движется с кинетической энергией  $E$ . Найти:

а) дебройлевскую длину волны; б) значения энергии электрона, при которых погрешность в длине волны, определяемой по нерелятивистской формуле, не превышает одного процента.

1.11. Найти кинетическую энергию электрона, при которой его дебройлевская и комптоновская длины волн совпадают.

1.12. На какую кинетическую энергию должен быть рассчитан протонный ускоритель, чтобы исследовать структуры с линейными размерами  $l \approx 10^{-15}$  м?

1.13. Найти длину волны релятивистских электронов, подлетающих к антикатоде рентгеновской трубки, если длина волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра равна  $\lambda_k = 10,0$  пм.

1.14. Воспользовавшись формулой распределения Максвелла, найти функцию распределения молекул газа по дебройлевским длинам волн. Масса молекул –  $m$ , температура газа –  $T$ . Вычислить наиболее вероятную длину волны молекул водорода при  $T = 300$  К.

1.15. Функция распределения атомов в пучке по скоростям имеет вид:

$$f(u) \sim u^3 \exp(-u^2),$$

где  $u$  – отношение скорости атомов в пучке к наиболее вероятной скорости  $u_{\text{вер}} = \sqrt{2kT/m}$ . Найти функцию распределения по дебройлевским длинам волн. Вычислить наиболее вероятную длину волны в пучке атомов гелия при температуре источника 300 К.

1.16. Поток моноэнергетических электронов падает нормально на диафрагму с узкой щелью шириной  $b = 2,0$  мкм. Найти скорость электронов, если на экране, отстоящем от щели на расстоянии  $l = 50$  см, ширина центрального дифракционного максимума  $\Delta x = 0,36$  мм.

1.17. Найти кинетическую энергию электронов, падающих нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, если на экране, отстоящем от диафрагмы на  $l = 75$  см, наблюдаются максимумы, расстояние между которыми  $\Delta x = 7,5$  мкм. Расстояние между щелями  $d = 25$  мкм.

1.18. Узкий пучок моноэнергетических электронов падает под углом скольжения  $\theta = 30^\circ$  на естественную грань монокристалла алюминия. Расстояние между соседними кристаллическими плоскостями, параллельными этой грани монокристалла,  $d = 0,20$  нм. При некотором ускоряющем напряжении  $U_0$  наблюдали максимум зеркального отражения. Найти  $U_0$ , если известно, что следующий максимум зеркального отражения возникал при увеличении ускоряющего напряжения в  $\eta = 2,25$  раза.

1.19. Пучок электронов с кинетической энергией  $E = 180$  эВ падает нормально на поверхность монокристалла никеля. В направлении, составляющем угол  $\alpha = 55^\circ$  с нормалью к поверхности, наблюдается максимум отражения четвертого порядка. Найти межплоскостное расстояние, соответствующее этому отражению.

1.20. Пучок электронов с кинетической энергией  $E = 10$  кэВ проходит через тонкую поликристаллическую фольгу и образует систему дифракционных колец на экране, отстоящем от фольги на расстоянии  $l = 10,0$  см. Найти межплоскостное расстояние, для которого максимум отражения третьего порядка соответствует кольцу с радиусом  $r = 1,6$  см.

1.21. Электроны с кинетической энергией  $E = 100$  эВ падают под углом  $\alpha = 30^\circ$  к нормали на систему из двух параллельных сеток, между которыми имеется задерживающая разность потенциалов  $U = 51$  В (рис. 1.6). Найти:

а) относительный показатель преломления области 2 относительно области 1;

б) значение  $U_{кр}$ , при котором данные электроны не проникнут в область 2.

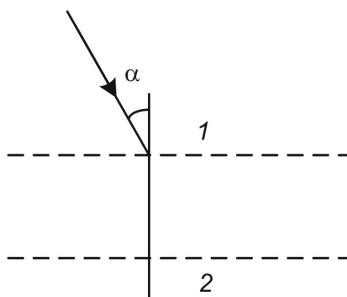


Рис. 1.6

1.22. Показать, что при преломлении электронной волны соблюдается закон преломления  $\sin \alpha / \sin \beta = n$ . Указание. При проникновении в кристалл изменяется лишь нормальная компонента скорости электрона.

1.23. Пучок электронов, ускоренных напряжением  $U = 150$  В, падает на поверхность никеля, внутренний потенциал которого  $U_i = 15$  В (внутренний потенциал определяется отношением энергии, затраченной на вытаскивание электрона из металла, к величине заряда электрона). Найти показатель преломления никеля.

1.24. Пучок электронов с кинетической энергией  $E = 60$  эВ падает на поверхность платины, внутренний потенциал которой  $U_i = 12$  В. Угол падения  $\alpha = 60^\circ$ . Найти угол преломления.

1.25. Показать, что формула Вульфа-Брэггов с учетом преломления электронных волн в кристалле должна иметь вид:  $2d\sqrt{n^2 - \cos^2 \theta} = k\lambda$ , где  $d$  – межплоскостное расстояние,  $n$  – показатель преломления,  $\theta$  – угол скольжения,  $k$  – порядок отражения. Считать, что отражающая плоскость параллельна поверхности

кристалла. Найти с помощью этой формулы внутренний потенциал монокристалла серебра, если пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов  $U = 85$  В, образует максимум второго порядка при зеркальном отражении от кристаллических плоскостей с  $d = 204$  пм под углом  $\theta = 30^\circ$ .

1.26. Частица массой  $m$  находится в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$ . Найти возможные значения энергии частицы, полагая, что реализуются лишь такие состояния, для которых в яме укладывается целое число дебройлевских полуволн.

1.27. Показать, что стационарным боровским орбитам электрона в атоме водорода соответствует целое число дебройлевских волн. Найти длину волны электрона на орбите с номером  $n$ .

1.28. Полагая скорость движения частицы  $\mathfrak{V}$  равной групповой скорости волн де Бройля  $u$ , найти в нерелятивистском случае фазовую скорость этих волн  $w$ , а также связь между энергией частицы  $E = m\mathfrak{V}^2/2$  и частотой  $\nu$ .

1.29. Поток электронов с дебройлевской длиной волны  $\lambda = 11$  мкм падает нормально на прямоугольную щель шириной  $b = 0,10$  мм. Оценить с помощью соотношения неопределенностей угловую ширину пучка за щелью.

1.30. Оценить неопределенность скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома порядка  $0,1$  нм. Сравнить полученное значение со скоростью электрона на первой боровской орбите.

1.31. В некоторый момент времени область локализации свободного электрона составляет  $\Delta x_0 = 0,10$  нм. Оценить ширину области локализации электрона спустя  $1$  с.

1.32. Оценить минимальную кинетическую энергию электрона, локализованного в области размером  $l = 0,1$  нм.

1.33. Электрон с кинетической энергией  $E = 10$  эВ локализован в области размером  $l = 1,0$  мкм. Оценить относительную неопределенность скорости электрона.

1.34. Частица массой  $m$  локализована в области размером  $l$ . Оценить кинетическую энергию  $E$  частицы, при которой ее относительная неопределенность будет порядка  $1\%$ .

1.35. Ускоряющее напряжение на электронно-лучевой трубке  $U = 10$  кВ. Расстояние от электронной пушки до экрана  $l = 20$  см.

Оценить неопределенность координаты электрона на экране, если след электронного пучка на экране имеет диаметр  $d = 0,5$  мм.

1.36. Атом испустил фотон с длиной волны  $\lambda = 0,58$  мкм за время  $\tau = 10^{-8}$  с. Оценить неопределенность  $\Delta x$ , с которой можно установить координату фотона в направлении его движения, а также относительную неопределенность его длины волны.

1.37. Частица находится в одномерной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Оценить силу давления частицы на стенки при минимально возможном значении ее энергии  $E_{\min}$ .

1.38. Оценить минимально возможную энергию  $E_{\min}$  гармонического осциллятора массой  $m$  с частотой колебаний  $\omega = \sqrt{k/m}$ , находящегося в одномерном потенциальном поле  $U(x) = kx^2/2$ .

1.39. Оценить минимально возможную энергию электронов в атоме гелия и соответствующее расстояние электронов до ядра.

1.40. Свободно движущаяся нерелятивистская частица имеет относительную неопределенность кинетической энергии порядка  $1,6 \cdot 10^{-4}$ . Оценить, во сколько раз неопределенность координаты такой частицы больше ее дебройлевской длины волны.

1.41. Параллельный пучок атомов водорода со скоростью  $v = 1,2$  км/с падает нормально на диафрагму с узкой щелью, за которой на расстоянии  $l = 100$  см расположен экран. Оценить ширину щели  $b$ , при которой эффективная ширина изображения на экране будет минимальной.

1.42. Среднее время жизни атома в возбужденном состоянии составляет величину порядка  $\Delta\tau \approx 10^{-8}$  с. При переходе атома в нормальное состояние испускается фотон, средняя длина волны которого  $\lambda = 500$  нм. Оценить ширину  $\Delta\lambda$  и относительную ширину  $\Delta\lambda/\lambda$  излучаемой спектральной линии, если не происходит ее уширения за счет других процессов (такая ширина называется естественной шириной спектральной линии).

1.43. Из ускорителя через щель выводится короткий сгусток протонов с энергией  $E = 100$  кэВ. Оценить минимально достижимую ширину пучка протонов на расстоянии  $L = 100$  м от выходной щели.

1.44. Пучок протонов из ускорителя выводится через отверстие диаметром  $d$ . Используя соотношение неопределенностей, найти минимальный диаметр  $D$  пучка на экране, расположенном на расстоянии  $L$  от отверстия, если радиус орбиты в ускорителе равен  $r$ , а величина индукции магнитного поля в момент вывода пучка равна  $B$ .

1.45. Оценить минимально достижимый диаметр  $d$  пятна, создаваемого на экране пучком электронов, если время пролета электронов от коллиматора до экрана равно  $\tau = 10^{-8}$  с.

1.46. Оценить минимально достижимый диаметр  $d$  пятна, который можно создать на детекторе пучком атомов серебра, испускаемого печью с температурой  $t = 1200$  °С. Расстояние от выходной щели печи до детектора равно  $L = 1$  м. Расчет произвести:

а) исходя из волновой природы частиц, как радиус первой зоны Френеля;

б) из соотношения неопределенностей. Убедиться в эквивалентности обоих подходов.

1.47. Один из методов измерения силы заключается в определении изменения энергии пробного тела массой  $m$  до и после действия силы. Оценить, какую минимальную постоянную силу, действующую в направлении скорости частицы, можно измерить таким образом, если полное время эксперимента, включая время измерения начальной энергии, равно  $\tau$ , а начальная энергия тела  $E_0$  много больше приращения энергии.

### ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ «УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА»

1.48. Как изменится волновая функция  $\psi(x, t)$ , описывающая стационарные состояния, если сдвинуть начало отсчета потенциальной энергии на некоторую величину  $\Delta U$  ?

1.49. Найти решение временного уравнения Шредингера для свободной частицы, движущейся с импульсом  $\vec{p}$  в произвольном направлении.

1.50. Установить связь между волновыми функциями  $\psi(x, t)$  и  $\psi'(x', t)$ , характеризующими свободное движение нерелятивистской частицы массы  $m$  в инерциальных –  $K$ - и  $K'$ -системах отсчета,



если  $K'$ -система движется со скоростью  $\mathfrak{V}_0$  в положительном направлении оси  $X$   $K$ -системы. Скорость частицы в  $K'$ -системе совпадает по направлению с  $\mathfrak{V}_0$ .

1.51. Показать, что в точке, где потенциальная энергия частицы  $U(x)$  имеет конечный разрыв, волновая функция остается гладкой, т.е. первая производная по координате непрерывна.

1.52. Частица массой  $m$  находится в одномерном потенциальном поле  $U(x)$  в стационарном состоянии, для которого волновая функция имеет вид  $\psi(x) = A \exp(-\alpha x^2)$ , где  $A$  и  $\alpha$  – заданные постоянные ( $\alpha > 0$ ). Полагая  $U(x) = 0$  при  $x = 0$ , найти  $U(x)$  и энергию  $E$  частицы.

1.53. Частица массой  $m$  находится в одномерном потенциальном поле  $U(x)$  в стационарном состоянии, для которого волновая функция имеет вид:  $\psi(x) = A x \exp(-\alpha x)$  при  $x > 0$  и  $\psi = 0$  при  $x < 0$ . Полагая  $U(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \infty$ , найти  $U(x)$  и энергию  $E$  частицы.

1.54. Частица находится в сферически симметричном потенциальном поле в стационарном состоянии  $\psi(r) = 1/(r\sqrt{2\pi a}) \exp(-r/a)$ , где  $a$  – постоянная,  $r$  – расстояние от центра силового поля. Найти среднее расстояние от центра  $\langle r \rangle$ .

1.55. Частица массой  $m$  находится в одномерном потенциальном поле  $U(x) = kx^2$ , где  $k$  – положительная постоянная. Найти среднее значение  $\langle U \rangle$  частицы в состоянии  $\psi(x) = A \exp(-\alpha x^2)$ , где  $A$  и  $\alpha$  – заданные постоянные ( $\alpha > 0$ ).

1.56. Показать, что для волновой функции выполняется соотношение, аналогичное классическому уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \text{ где } \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi) - \text{вектор плотности потока вероятности.}$$

*Указание.* Воспользоваться нестационарным уравнением Шредингера.

1.57. Воспользовавшись стационарным уравнением Шредингера, показать, что из него следует взаимная ортогональность волновых функций состояний с различной энергией.

## 2. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ БАРЬЕРЫ И ЯМЫ

### 2.1. ДВИЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ

Рассмотрим для простоты одномерное движение вдоль оси  $X$  свободной частицы. Примем для нее значение потенциальной энергии  $U = 0$ . По идее де Бройля, такой частице можно сопоставить некоторую бегущую плоскую волну

$$\psi(x, t) = a \exp[-i(\omega t - kx)],$$

где  $a$  – некоторый постоянный (в общем случае комплексный) множитель, который можно назвать амплитудой волновой функции,  $\omega$  – частота,  $k$  – волновое число. Эти параметры связаны с энергией  $E$  и импульсом  $p$  следующим образом:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}.$$

В общем случае неоднородного движения последнее соотношение можно представить в векторном виде  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ . Мы привыкли описывать плоские волны выражением типа  $\sin(\omega t - kx)$  или  $\cos(\omega t - kx)$ . С учетом формулы Эйлера

$$\exp(ix) = \cos x + i \sin x$$

волновые множители всегда можно представлять в экспоненциальном виде.

Легко проверить, что выражение для плоской волны является решением уравнения Шредингера при  $U = 0$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Для этого найдем производные

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi, \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi = -i \frac{E}{\hbar} \psi$$

и подставим их в уравнение Шредингера. Тогда получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(-\psi)k^2 = i\hbar(-i\omega\psi) = i\hbar(-i\frac{E}{\hbar}\psi).$$

Сократим на  $\psi$  и вспомним, что  $p = \hbar k$ . Отсюда получаем известное соотношение, связывающее энергию и импульс:  $\frac{p^2}{2m} = E$ . Это свидетельствует о том, что плоская волна на самом деле является решением уравнения Шредингера.

Для частицы, движущейся против оси  $X$ , получаем:

$$\psi = a \exp[-i(\omega t + kx)] = a \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et + px)\right].$$

Конечно, полученные выражения для волновой функции не имеют никакой наглядной интерпретации. Смысл полученных решений заключается в следующем: **квадрат модуля волновой функции  $\psi\psi^*$  дает плотность вероятности обнаружить частицу в данном месте пространства**. Найдем эту величину для свободной частицы:

$$\psi\psi^* = a \exp[-i(\omega t - kx)]a^* \exp[i(\omega t - kx)] = |a|^2 \neq f(x, y, z).$$

Что же мы получили? Вероятность обнаружить частицу везде одинакова! Но в этом нет ничего странного. Для свободно движущейся частицы значение импульса  $p$  вполне определено ( $\Delta p = 0$ ) и в силу принципа неопределенности Гейзенберга ( $\Delta p \Delta x \approx \hbar$ ) получаем, что  $\Delta x$  стремится к бесконечности. То есть мы не можем сказать, где находится частица в данный момент времени. Для того чтобы определить положение частицы, необходимо подействовать на нее каким-либо прибором для измерения координаты. А это означает, что частица уже не является свободной. Необходимо помнить, что эти выражения описывают состояние не только с определенным значением импульса, но и определенным значением энергии. Причем  $E > 0$  и энергетический спектр является непрерывным.

## 2.2. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Рассмотрим теперь одномерное движение частицы, на пути которой находится так называемый потенциальный барьер (рис. 2.1). Что это такое? В простейшем варианте – это некоторая

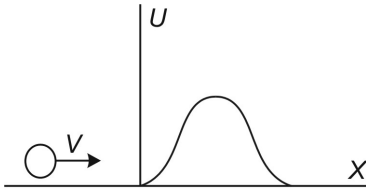


Рис. 2.1

горка, которую должна преодолеть частица, движущаяся по горизонтальной плоскости в поле тяжести. Что было бы в классической механике? Если полная энергия частицы  $E$  больше максимума потенциальной энергии  $U_0$ , то частица проскакивает эту горку

и движется дальше (в области барьера только будет меньше скорость). Если энергия меньше высоты горки, то частица должна отразиться от барьера и никогда не окажется справа от него (в области  $E < U_0$  кинетическая энергия частицы должна стать отрицательной).

А как обстоит дело в квантовой механике? При  $E > U_0$  существует вероятность того, что частица отразится от барьера и полетит обратно! При  $E < U_0$  существует ненулевая вероятность того, что частица преодолеет барьер и полетит дальше! Связано это с тем, что в квантовой механике это неравенство для кинетической и потенциальной энергии частицы не имеет смысла, так как невозможно знать их точно одновременно. Потенциальная энергия – функция координат, а кинетическая – функция импульса. А координату и импульс нельзя измерить точно одновременно

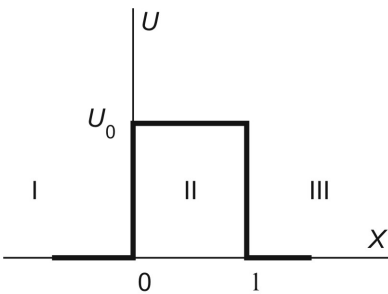


Рис. 2.2

в силу принципа неопределенности. Поэтому заключение об отрицательности кинетической энергии частицы внутри барьера также становится бессмысленным.

Итак, рассмотрим задачу: частица налетает на прямоугольный барьер, причем  $E < U_0$  (рис. 2.2).

Запишем для этого случая уравнение Шредингера в стационарной форме:

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

где функция  $U(x)$  имеет вид, представленный на рис. 2.2. Тогда для областей I и III уравнение Шредингера запишется в виде:

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

Для области II:

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

Введем обозначения:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E, \quad \beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E).$$

С учетом этих обозначений приходим к системе линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами:

$$\text{для областей I, III} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad \text{для области II} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta^2\psi = 0.$$

Решение данной системы уравнений, очевидно, следует искать в виде:

$$\psi_1 = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx) \quad \text{для области I,}$$

$$\psi_2 = A_2 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x) \quad \text{для области II,}$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ikx) + B_3 \exp(-ikx) \quad \text{для области III.}$$

Первое слагаемое в  $\psi_1$  дает волну, бегущую вдоль оси  $X$ , т.е. падающую на барьер (точнее, здесь представлена только ее координатная часть). Второе слагаемое – волна, бегущая против оси  $X$ , – это волна, отраженная от барьера. Первое слагаемое в  $\psi_3$  – волна, прошедшая сквозь барьер, второе – волна справа от барьера, но бегущая против оси  $X$ . Так как ей взятись неоткуда, то следует положить  $B_3 = 0$ . Внутри потенциального барьера

волновая функция экспоненциально затухает по мере проникновения вглубь барьера.

Если  $\psi_1$  нормировать таким образом, чтобы  $A_1=1$ , то  $D = |A_3|^2$  будет определять вероятность прохождения частицы через барьер – назовем его коэффициентом прохождения. Тогда  $R = |B_1|^2$  следует назвать коэффициентом отражения. Очевидно,  $D + R = 1$ . Откуда взять  $A_3$ , который определяет коэффициент прохождения  $D$ ? Во-первых, волновая функция должна быть непрерывной, это означает, что выполняются условия:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi_2(l) = \psi_3(l).$$

Кроме того, можно показать, что волновая функция должна быть гладкой, это означает равенство первых производных по координате

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0), \quad \psi'_2(l) = \psi'_3(l).$$

Используя эти условия, для всех неизвестных коэффициентов  $A$  и  $B$  получаем систему линейных алгебраических уравнений:

$$1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$A_2 \exp(\beta l) + B_2 \exp(-\beta l) = A_3 \exp(i\alpha l)$$

$$i\alpha - i\alpha B_1 = \beta A_2 - \beta B_2$$

$$\beta A_2 \exp(\beta l) - \beta B_2 \exp(-\beta l) = i\alpha A_3 \exp(i\alpha l)$$

Нас будет интересовать только прохождение частицы через потенциальный барьер, поэтому ограничимся коэффициентом прохождения  $D$ . Для него можно получить при  $\beta l \gg 1$  приближенное выражение (полный вывод приведен в [1]):

$$D \approx \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} l \right].$$

Вероятность просачивания частицы через барьер сильно зависит от его ширины. Для потенциального барьера произвольной формы (рис. 2.3) полученное выражение для  $D$  следует заменить на

$$D \approx \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U - E)} dx \right]. \quad (2.1)$$

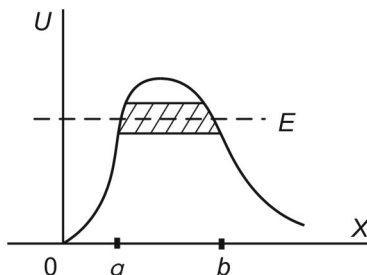


Рис. 2.3

При преодолении потенциального барьера частица как бы проходит через «туннель» внутри него. Поэтому данное явление и назвали туннельным эффектом.

## 2.3. ПРОЯВЛЕНИЯ ТУННЕЛЬНОГО ЭФФЕКТА

Рассмотрим применение туннельного эффекта к явлению  $\alpha$ -распада. Известно, что большое число радиоактивных ядер распадается с испусканием  $\alpha$ -частиц. Можно предположить, что  $\alpha$ -частицы еще до распада заключены в ядрах радиоактивных атомов как в потенциальной яме. Эта яма внутри имеет вертикальную стенку при  $r = R$  ( $R$  – радиус ядра, отрицательное значение энергии внутри ядра связано с наличием поля короткодействующих ядерных сил), а снаружи определяется законом Кулона (рис. 2.4).

Будем полагать, что энергия вылетающих  $\alpha$ -частиц много меньше высоты потенциального барьера ( $E_\alpha \ll U_0$ ). С точки зрения классической физики  $\alpha$ -распад в принципе невозможен! Однако за счет туннельного эффекта существует некоторая не равная нулю вероятность обнаружить  $\alpha$ -частицу за пределами ядра.

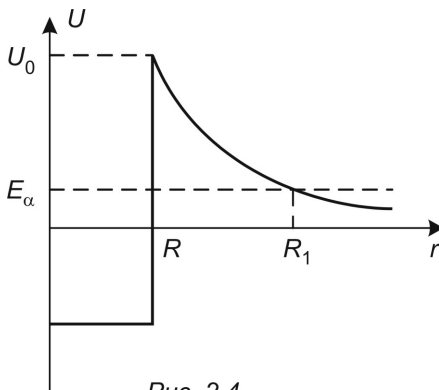


Рис. 2.4

Вероятность распада ядра в единицу времени, которая является постоянной распада  $\lambda$ , пропорциональна числу столкновений  $\alpha$ -частиц с потенциальной стенкой за 1с- $n$  и коэффициенту прохождения потенциального барьера  $D$ :

$$\lambda = nD .$$

Число столкновений  $\alpha$ -частиц со стенкой барьера можно приближенно записать в виде:

$$n \approx \vartheta / 2R ,$$

где  $\vartheta$  – скорость  $\alpha$ -частицы с массой  $m_\alpha$  внутри ядра. Скорость можно оценить из соотношения неопределенностей:

$$\vartheta = \frac{p_\alpha}{m_\alpha} \approx \frac{\hbar}{m_\alpha R} .$$

Таким образом, вероятность распада в единицу времени можно приближенно представить в виде:

$$\lambda \approx \frac{\hbar D}{2m_\alpha R^2} .$$

Оценим теперь коэффициент прохождения  $\alpha$ -частицей потенциального барьера. Так как заряд  $\alpha$ -частицы  $q_\alpha = 2e$ , то оставшаяся часть ядра с порядковым номером  $Z$  имеет заряд  $q = (Z - 2)e$ . Тогда внешний склон потенциальной энергии взаимодействия  $\alpha$ -частицы и оставшегося ядра будет представлен выражением (в гауссовой системе единиц)

$$U(r) = \frac{qq_\alpha}{r} .$$

Таким образом, для коэффициента прохождения барьера (2.1) получаем

$$D \approx \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_R^{R_1} \sqrt{2m_\alpha \left( \frac{qq_\alpha}{r} - E_\alpha \right)} dr \right] .$$



В силу заложенных условий в подынтегральном выражении можно пренебречь величиной  $E_\alpha$ . Вычислим этот интеграл:

$$I = -\frac{2}{\hbar} \int_R^{R_1} \sqrt{\frac{2m_\alpha q q_\alpha}{r}} dr = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m_\alpha q q_\alpha} \int_R^{R_1} r^{-1/2} dr.$$

Кроме того, из рис. 2.4 видно, что  $\frac{q q_\alpha}{R_1} = E_\alpha$ , откуда  $R_1 = \frac{q q_\alpha}{E_\alpha}$ .

Тогда интеграл  $I$  примет значение:

$$I = -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2m_\alpha q q_\alpha R_1} \left(1 - \sqrt{\frac{R}{R_1}}\right).$$

Если воспользоваться очевидным неравенством  $R_1 \gg R$  и тем, что  $R_1 = \frac{q q_\alpha}{E_\alpha}$ , для коэффициента прохождения  $D$  получим приближенное выражение:

$$D \approx \exp\left(-\frac{4}{\hbar} q q_\alpha \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E_\alpha}}\right).$$

Период полураспада ядра  $T$ , как известно, связан с постоянной распада  $\lambda$  соотношением:

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

И для него получаем значение:

$$T \approx \frac{2m_\alpha R^2 \ln 2}{\hbar D} \approx \frac{2m_\alpha R^2 \ln 2}{\hbar} \exp\left(\frac{4}{\hbar} q q_\alpha \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E_\alpha}}\right).$$

После логарифмирования полученного выражения приходим к соотношению:

$$\ln T \approx A + \frac{B}{\sqrt{E_\alpha}},$$

где  $A$  и  $B$  – очевидные константы.

Полученное выражение отражает закон Гейгера – Неттола, согласно которому скорость  $\alpha$ -частиц для элементов с малым периодом полураспада больше, чем для долгоживущих.

Другие проявления туннельного эффекта:

1. Автоэлектронная эмиссия – испускание электронов с поверхности твердых тел и жидкостей под действием сильного электрического поля.

2. Эффект Джозефсона – протекание сверхпроводящего тока через тонкий слой изолятора, разделяющий два сверхпроводника.

3. Туннельный диод.

4. Спонтанное деление атомных ядер и т.д.

И, как это ни парадоксально, протекание электрического тока через металл (т.е. движение электронов через кристаллическую решетку) в принципе невозможно без туннельного эффекта (об этом речь пойдет позднее).

## 2.4. КВАНТОВАЯ ЧАСТИЦА В БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Рассмотрим стационарные состояния микрочастицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

Пусть частица может двигаться только вдоль оси  $X$ . Потенциальная энергия такой частицы равна нулю при  $0 \leq x \leq l$  и обращается в бесконечность вне этого интервала (рис. 2.5). Найдем

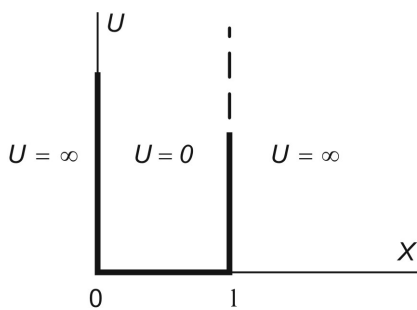


Рис. 2.5

собственные функции и собственные значения энергии частицы в такой яме.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний в данном случае будет иметь вид:

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

Так как за пределы такой ямы частица попасть не может, то вероятность обнаружить частицу вне ямы равна нулю и соответственно волновая функция так же равна нулю. Из условия непрерывности следует, что  $\psi$  должна быть равна нулю и на границах ямы. Таким образом, требуется решить дифференциальное уравнение

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

при граничных условиях  $\psi(0) = \psi(l) = 0$ . Введем обозначение:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E,$$

где параметр  $k$  имеет смысл волнового числа волны де Бройля для данной частицы. Решение дифференциального уравнения будем искать в виде:

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

где  $a$  – амплитуда волновой функции,  $\alpha$  – некоторая постоянная. Из граничного условия  $\psi(0) = 0$  сразу следует  $\alpha = 0$ , а из условия  $\psi(l) = 0$  следует, что  $a \sin(kl) = 0$ . Так как амплитуда не равна нулю, то последнее соотношение будет выполнено при условии

$$kl = \pm n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Итак, набор собственных волновых функций имеет вид:

$$\psi(x) = a \sin(n\pi x / l).$$

Для нахождения амплитуды волновой функции необходимо учесть условие нормировки

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

Откуда сразу следует  $a = \sqrt{2/l}$ . Таким образом, получаем окончательно выражение для собственных функций:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(n\pi x / l), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

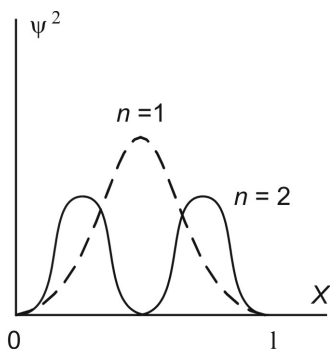


Рис. 2.6

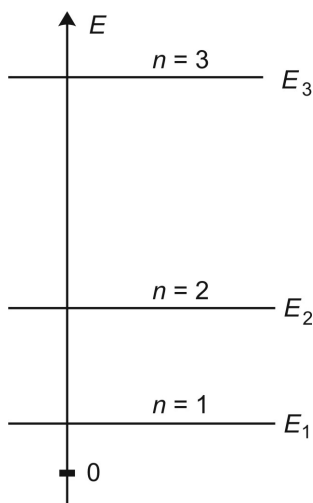


Рис. 2.7

На рис. 2.6 приведены графики плотности вероятности обнаружения частицы в различных местах ямы. Из них следует, например, что в состоянии с  $n = 2$  частица не может быть обнаружена в середине ямы. Такое поведение частицы никак не совместимо с представлениями о траектории (по «классике», все положения частицы в потенциальной яме с плоским дном должны быть равновероятны!).

С учетом связи волнового числа и энергии получаем собственные значения энергии частицы:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \text{ где } n = 1, 2, 3, \dots,$$

т.е. спектр энергии частицы в бесконечно глубокой яме оказался дискретным (рис. 2.7). Дискретность энергии является следствием ограниченности движения частицы и малости ее массы. Квантовое число  $n$  характеризует не только номер состояния, но и значения энергии, поэтому оно называется главным квантовым числом. Состояние с  $n = 1$  называется основным (невозбужденным), остальные — возбужденными.

## 2.5. КВАНТОВАЯ ЧАСТИЦА В ЯМЕ КОНЕЧНОЙ ГЛУБИНЫ

Пусть теперь потенциальная яма имеет конечную глубину  $-U_0$  (рис. 2.8). За начало координат примем центр ямы. Рассмотрим вначале ситуацию, когда полная энергия частицы  $E$  отрицательна. В этом случае стационарное уравнение Шредингера можно записать в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + U_0)\psi = 0, \quad |x| \leq l,$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0, \quad |x| > l.$$

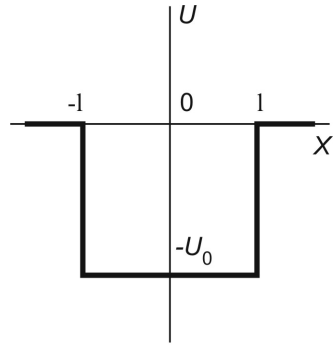


Рис. 2.8

Введем обозначения:

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E + U_0) = k^2, \quad -\frac{2m}{\hbar^2}E = \alpha^2.$$

Тогда уравнение Шредингера запишется в более простом виде

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad \text{— внутри ямы,}$$

$$\psi'' - \alpha^2\psi = 0 \quad \text{— вне ямы.}$$

Эти уравнения имеют очевидные решения:

$$\psi_1(x) = A \cos kx + B \sin kx, \quad \text{внутри ямы;}$$

$$\psi_2(x) = C \exp(-\alpha x), \quad \text{вне ямы при } x > l;$$

$$\psi_3(x) = D \exp(\alpha x), \quad \text{вне ямы при } x < -l.$$

Выбор знака в экспоненциальном множителе для волновой функции вне ямы обусловлен требованием конечности функции на бесконечности. Из соображений симметрии следует, что плотность вероятности  $\psi^2$  должна быть симметричной функцией относительно  $x = 0$ . Это может быть выполнено при условии, что либо  $A = 0$ , либо  $B = 0$ . Кроме того, необходимо потребовать, чтобы

$C^2 = D^2$ . Отсюда следует, что либо  $C = D$ , либо  $C = -D$ . Постоянные  $A, B, C, D$  можно определить из условий непрерывности и гладкости волновых функций на границах  $x = \pm l$ :

$$\psi_1(-l) = \psi_3(-l), \quad \psi_1(l) = \psi_2(l), \quad \psi_1'(-l) = \psi_3'(-l), \quad \psi_1'(l) = \psi_2'(l).$$

Отсюда сразу следует система линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов  $A, B, C, D$ :

$$A \cos kl + B \sin kl = C \exp(-\alpha l) \quad (2.2)$$

$$-kA \sin kl + kB \cos kl = -\alpha C \exp(-\alpha l) \quad (2.3)$$

$$A \cos kl - B \sin kl = D \exp(-\alpha l) \quad (2.4)$$

$$kA \sin kl + kB \cos kl = \alpha D \exp(-\alpha l) \quad (2.5)$$

Мы не будем ставить перед собой задачу отыскания собственных функций частицы в яме конечной глубины, а найдем только собственные значения энергии, точнее, найдем способ определения энергии и особенности энергетического спектра. Для этого вначале сложим уравнения (2.2) и (2.4):

$$2A \cos kl = (C + D) \exp(-\alpha l). \quad (2.6)$$

Вычтем уравнения (2.2) и (2.4):

$$2B \sin kl = (C - D) \exp(-\alpha l). \quad (2.7)$$

Сложим уравнения (2.3) и (2.5):

$$2kB \cos kl = \alpha(D - C) \exp(-\alpha l). \quad (2.8)$$

Вычтем уравнения (2.3) и (2.5):

$$2kA \sin kl = \alpha(C + D) \exp(-\alpha l). \quad (2.9)$$

Если  $A \neq 0$  и  $C = D$ , то после деления уравнений (2.9) и (2.6) получаем

$$ktgkl = \alpha. \quad (2.10)$$

Если  $B \neq 0$  и  $C = -D$ , то после деления уравнений (2.8) и (2.7) получаем

$$kctgkl = -\alpha. \quad (2.11)$$

Эти условия не могут быть удовлетворены одновременно, так как это привело бы к соотношению  $k^2 = -\alpha^2$ , а параметры  $k$  и  $\alpha$  вещественны. Таким образом, для определения энергии необходимо как-то решить уравнение (2.10) – ему соответствует решение с четной волновой функцией ( $A \neq 0, B = 0, C = D$ ), либо уравнение (2.11) – ему соответствует решение с нечетной волновой функцией ( $A = 0, B \neq 0, C = -D$ ). Эти уравнения не совсем приятны для решения, но, если нужны не сами значения энергии, а характер ее распределения (дискретный или непрерывный), то можно поискать их графическое решение. Для этого введем безразмерные параметры

$$\xi = kl \quad \text{и} \quad \eta = \alpha l.$$

Тогда получаем для решений с четной волновой функцией

$$\xi \operatorname{tg} \xi = \eta, \quad (2.12)$$

а для решений с нечетной волновой функцией –

$$\xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta. \quad (2.13)$$

Кроме того, параметры  $\xi$  и  $\eta$  должны быть связаны соотношением:

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 l^2.$$

Последнее соотношение следует из определения параметров  $k$  и  $\alpha$ . На рис. 2.9 приведены графики зависимости  $\xi \operatorname{tg} \xi = \eta$  ( $\xi, \eta > 0$ ) и  $\xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta$ .

Кроме того, отображено уравнение окружности  $\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 l^2 = \text{const}$ . Координаты пересечения этих кривых и окружности дадут значения параметров  $\eta$  и  $\xi$ , из которых следуют  $k$  и  $\alpha$  и, соответственно, значения энергии частицы.

Из рисунка 2.9 видно, во-первых, что спектр уровней энергии дискретен (похоже на бесконечно глубокую яму), во-вторых, число уровней всегда конечно (не похоже на бесконечно глубокую яму) и определяется глубиной ямы и ее шириной. Кроме того, в любой ситуации существует хотя бы один уровень энергии – «нулевой».

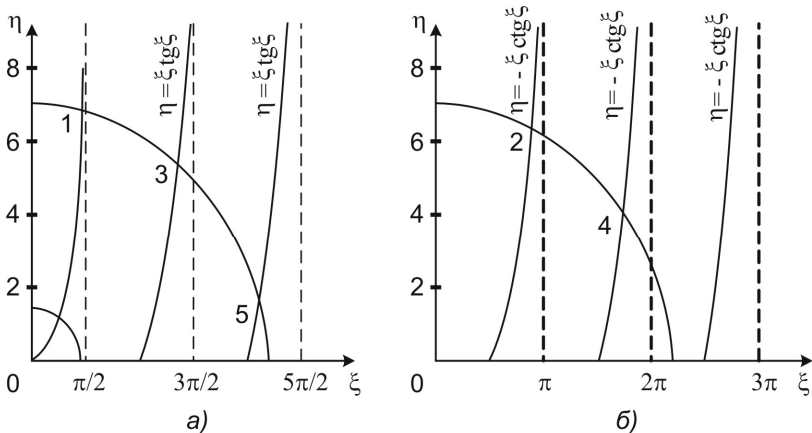


Рис. 2.9

Рассмотрим теперь ситуацию с положительной энергией. В этом случае  $\alpha = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$  – чисто мнимая величина. Положим  $\alpha = i\beta$ . Тогда вне ямы уравнение Шредингера будет иметь вид:

$$\psi'' + \beta^2 \psi = 0.$$

Его решение

$$\psi(x) = A' \cos \beta x + B' \sin \beta x, \quad x > l$$

$$\psi(x) = A'' \cos \beta x + B'' \sin \beta x, \quad x < -l.$$

При  $|x| < l$  получаем (внутри ямы):

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

Для определения постоянных  $A', B', A'', B''$  необходимо «сшить» волновую функцию и ее производную внутри и вне ямы на границе. Но так как постоянные  $A$  и  $B$  могут принимать любые значения, то, как следствие, и постоянные  $A', B', A'', B''$  могут принимать любые непрерывные значения. Таким образом, мы не накладываем никаких ограничений на значения энергии. А из этого следует, что энергия при положительных значениях не квантуется и ее спектр непрерывен. Также необходимо заметить, что волновая функция уже не стремится к нулю вдали от ямы и тогда движение частицы инфинитно, т.е. бесконечно!



Самое необычное при отрицательных значениях энергии частицы – это то, что существует ненулевая вероятность обнаружить частицу за пределами ямы (очень похоже на прохождение частицей потенциального барьера). Представим такую ситуацию: большое число близко расположенных ям (например, кристаллическая решетка металла-проводника). Внутри какой-нибудь ямы сидит электрон. Если расстояние между ямами не очень велико, то существует ненулевая вероятность того, что электрон из одной ямы перескочит в соседнюю, или еще дальше! А это уже механизм проводимости металлов (более подробно мы остановимся на этом позднее).

## 2.6. КВАНТОВАНИЕ

### В СФЕРИЧЕСКИ СИММЕТРИЧНОМ СИЛОВОМ ПОЛЕ

Рассмотренные одномерные потенциальные ямы имеют скорее чисто принципиальное значение в понимании физической сути квантования энергии. В практическом плане более важен случай, когда потенциальная энергия  $U$  не одномерна, а сферически симметрична относительно некоторого силового центра.

К этому сводится, например, задача о поведении электрона в электрическом поле заряженного ядра, задача о взаимодействии протона с нейтроном в ядре дейтерия и многие другие. Будем полагать для простоты силовой центр неподвижным. В этом случае потенциальная энергия зависит только от расстояния от частицы до силового центра –  $U(r)$ .

В то же время волновая функция частицы может зависеть не только от расстояния  $r$ , но и от угловых переменных. Мы ограничимся только сферически симметричными решениями, т.е. будем полагать волновую функцию зависящей только от  $r$  –  $\psi(r)$ . В сферической системе координат уравнение Шредингера для стационарных состояний имеет вид:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0.$$

Введем новую функцию  $\phi = r\psi$ . Тогда уравнение Шредингера легко привести к виду:

$$\frac{d^2\phi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \phi = 0. \quad (2.14)$$

Это уравнение математически тождественно уравнению Шредингера для одномерного случая. Правда, здесь есть специфика. При  $r=0$  функция  $\phi$  должна обращаться в нуль, так как в противном случае волновая функция  $\psi = \phi/r$  обращалась бы в бесконечность.

Частным случаем сферически симметричного силового поля является трехмерная сферически симметричная потенциальная

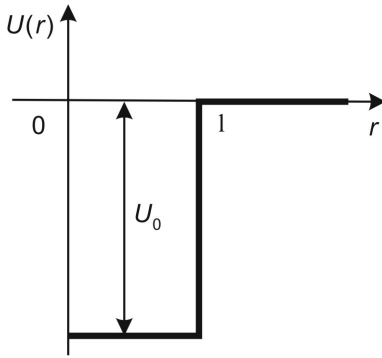


Рис. 2.10

яма, для которой сечение плоскостью, проходящей через силовой центр, имеет прямоугольную форму (рис. 2.10). В этом случае трехмерная потенциальная яма может быть представлена в виде:  $U(r) = -U_0$  при  $r < l$ , и равна нулю при  $r > l$ . Легко сообразить, что в качестве решений уравнения (2.14), конечных при  $r=0$  и обращающихся в нуль при  $r \rightarrow \infty$ , необходимо взять:

$$\phi = B \sin kr \text{ при } r \leq l,$$

$$\phi = C \exp(-\alpha r) \text{ при } r > l,$$

где

$$k = \sqrt{\frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

(так как мы рассматриваем частицу внутри потенциальной ямы, то, естественно, необходимо считать  $E < 0$ ). Таким образом, задача свелась к рассмотренной нами ранее одномерной потенциальной яме, поэтому и уровни энергии определяются так же, как и ранее. Различие состоит только в том, что теперь необходимо отбросить состояния с четными волновыми функциями и оставить лишь состояния с нечетными волновыми функциями. В соответствии с этим из двух формул – (2.12) и (2.13) – необходимо оставить лишь вторую:

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi,$$

причем  $\xi$  и  $\eta$  определяются прежними выражениями:  $\xi = kl$ ,  $\eta = \alpha l$ .

Принципиальное же отличие одномерной потенциальной ямы от трехмерной состоит в том, что для одномерных ям всегда существует, по крайней мере, одно собственное значение энергии с четной волновой функцией. В случае сферически симметричной прямоугольной ямы этого может и не быть. Из соотношения  $\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 l^2$  видно, что если  $(\pi/2) > 2mU_0 l^2 / \hbar^2$ , т.е. если

$$U_0 < \pi^2 \hbar^2 / (8ml^2), \quad (2.15)$$

то кривая, заданная уравнением  $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ , никогда не пересечется с окружностью, заданной уравнением  $\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 l^2$ . Это означает, что при выполнении условия (2.15) в потенциальной яме не появится ни одного уровня дискретного спектра энергии (из-за того, что глубина ямы слишком мала).

## ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ

### «ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР»

2.1. Стационарный поток частиц, имеющих массу  $m$  и энергию  $E$ , падает на абсолютно непроницаемую стенку (рис. 2.11):  $U(x) = 0$  при  $x > 0$  и  $U(x) \rightarrow \infty$  при  $x \leq 0$ . Найти распределение плотности вероятности местонахождения частиц  $w(x)$  и координаты точек максимума  $w(x)$ . Нарисовать примерный график функции  $w(x)$ .

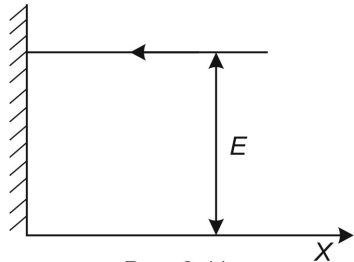


Рис. 2.11

2.2. Частица массой  $m$  падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$  (рис. 2.12). Показать, что при  $E < U_0$  коэффициент отражения  $R$  барьера равен единице. Найти распределение плотности вероятности  $w(x)$  местонахождения частицы для случая  $E = U_0/2$ . Изобразить примерный график функции  $w(x)$ .

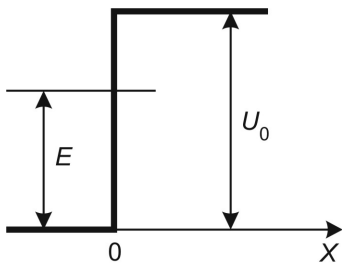


Рис. 2.12

2.3. Частица массой  $m$  падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$  (см. рис. 2.12). Энергия частицы  $E < U_0$ . Найти эффективную глубину  $x_{\text{эфф}}$  проникновения частицы под барьер, т.е. расстояние от границы барьера до точки, в которой плотность вероятности  $w(x)$  нахождения частицы уменьшается в  $e$  раз. Вычислить  $x_{\text{эфф}}$  для электрона, если  $U_0 - E = 1,0$  эВ.

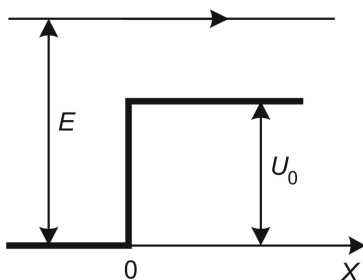


Рис. 2.13

2.4. Частица массой  $m$  падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$  (рис. 2.13). Энергия частицы  $E > U_0$ . Найти коэффициент отражения  $R$  и коэффициент прозрачности  $D$  этого барьера. Убедиться, что эти коэффициенты не зависят от направления движения частицы.

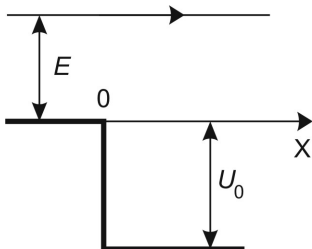


Рис. 2.14

2.5. Частица массой  $m$  падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$  (см. рис. 2.13). Энергия частицы  $E > U_0$ . Найти распределение плотности вероятности  $w(x)$  местонахождения частицы при  $E = 4U_0/3$ . Изобразить примерный график функции  $w(x)$ .

2.6. Частица массой  $m$  движется слева направо в потенциальном поле, которое в точке  $x=0$  испытывает скачок  $U_0$  (рис. 2.14). Слева от точки  $x=0$  энергия частицы равна  $E$ . Найти

коэффициент отражения  $R$  для случаев  $E \ll U_0$  и  $E \gg U_0$ .

2.7. Частица массой  $m$  падает на прямоугольную потенциальную яму шириной  $l$  и глубиной  $U_0$  (рис. 2.15). Энергия части-

цы вне ямы равна  $E$ . Найти коэффициент прозрачности  $D$  ямы и его значение для электрона при  $E = U_0 = 1,0$  эВ и  $l = 0,10$  нм.

2.8. Частица массой  $m$  падает на прямоугольную потенциальную яму шириной  $l$  и глубиной  $U_0$  (см. рис. 2.15). Энергия частицы вне ямы равна  $E$ . Найти значения энергии частицы, при которых она будет беспрепятственно проходить через яму. Убедиться, что это будет происходить при условии, что ширина ямы равна целому числу дебройлевских полуволн частицы внутри ямы. Вычислить  $E_{\min}$  для электрона при  $U_0 = 10$  эВ и  $l = 0,25$  нм.

2.9. Экспериментально обнаружено, что в сечении рассеяния медленных электронов на атомах криптона имеется глубокий минимум при  $E = 0,6$  эВ (резко увеличивается проникаемость атомов). Этот эффект обусловлен волновыми свойствами электронов. Считая, что для электрона потенциал атома является одномерной прямоугольной ямой глубиной  $U_0 = 2,5$  эВ (см. рис. 2.15), оценить радиус атома криптона.

2.10. Частица массой  $m$  падает на прямоугольную потенциальную яму шириной  $l$  и глубиной  $U_0$  (см. рис. 2.15). Энергия частицы вне ямы равна  $E$ . Найти длину ямы  $l$ , при которой коэффициент отражения максимален.

2.11. Частица массой  $m$  падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$  (рис. 2.16). Энергия частицы  $E > U_0$ . Найти коэффициент прозрачности барьера  $D$  и его выражение при  $E \rightarrow U_0$ . Определить значения энергии  $E$ , при которых частица будет беспрепятственно проходить через такой барьер.

2.12. Частица массой  $m$  падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$

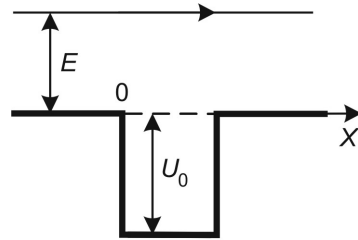


Рис. 2.15

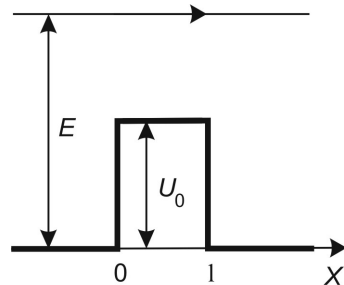


Рис. 2.16

(рис. 2.17). Энергия частицы  $E < U_0$ . Определить коэффициент прозрачности барьера  $D$  и упростить полученное выражение для  $D \ll 1$ .

2.13. Частица массой  $m$  падает слева на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0$  (см. рис. 2.17). Энергия частицы  $E < U_0$ . Нарисовать примерный график распределения плотности вероятности  $w(x)$  местонахождения частицы. Найти отношение плотностей вероятности  $w(0)/w(l)$  в точках  $x = 0$  и  $x = l$ .

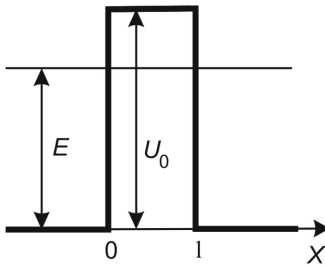


Рис. 2.17

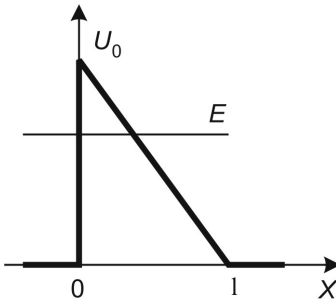


Рис. 2.18

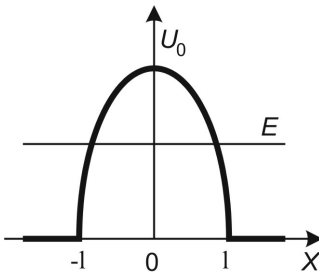


Рис. 2.19

2.14. Частица массой  $m$  падает на прямоугольный потенциальный барьер. При каких условиях частица не будет отражаться от потенциального барьера? Найти энергию электрона, при которой он беспрепятственно пройдет над прямоугольным барьером высотой  $U_0 = 5$  эВ и шириной  $l = 0,1$  нм.

2.15. Опираясь на выражение для коэффициента прозрачности

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U - E)} dx\right),$$

где  $a$  и  $b$  – координаты точек, между которыми  $U > E$ , найти вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер, показанный на рис. 2.18.

2.16. Опираясь на выражение для коэффициента прозрачности

$$D \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U - E)} dx\right),$$

где  $a$  и  $b$  – координаты точек, между которыми  $U > E$ , найти вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер, заданный выражением  $U(x) = U_0(1 - x^2/l^2)$  (рис. 2.19).

## ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ «ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ЯМЫ»

2.17. Частица массой  $m$  находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Найти собственные значения энергии частицы и ее нормированные собственные функции, если начало координат помещено в середине ямы ( $-l/2 \leq x \leq l/2$ ).

2.18. Частица массой  $m$ , находящаяся в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками, излучает фотон, переходя из состояния с номером  $(n+1)$  в состояние с номером  $n$ . Найти связь частоты фотона с классическим периодом колебаний частицы с энергией  $E_n$ .

2.19. Частица массой  $m$  находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Производная волновой функции у края ямы  $|d\psi/dx| = a$ . Найти энергию частицы.

2.20. Частица массой  $m$  находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Найти энергию частицы  $E$  в стационарном состоянии:

а) описываемом волновой функцией  $\psi = a \sin kx$ , где  $a$  и  $k$  – заданные постоянные,  $x$  – расстояние от края ямы;

б) если число узлов волновой функции  $\psi(x)$  равно  $N$ .

2.21. Частица массой  $m$  находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Найти:

а) массу частицы, если разность энергий 3-го и 2-го энергетических уровней равна  $\Delta E$ ;

б) квантовое число  $n$  энергетического уровня частицы, если интервалы энергии до соседних с ним уровней (верхнего и нижнего) относятся как  $\eta : 1$ , где  $\eta = 1, 4$ .

2.22. Частица массой  $m$  находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Найти число энергетических уровней  $dN$  в интервале энергий  $(E, E + dE)$ , если уровни расположены очень плотно.

2.23. Частица массой  $m$  находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Найти:

- а) силу давления частицы на стенку;
- б) работу, которую необходимо совершить, чтобы медленно сжать яму в  $\eta$  раз.

2.24. В одномерной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками находится  $N$  электронов. Определить минимальное значение полной энергии  $E_{\min}$  и силу давления электронов на стенки. Взаимодействием электронов пренебречь.

Указание. Учесть, что 
$$\sum_{n=1}^N n^2 = \frac{N(N+1)(N+2)}{6}.$$

2.25. Частица массой  $m$  находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками. Найти вероятность нахождения частицы в области  $l/3 < x < 2l/3$ .

2.26. Частица массой  $m$  находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Максимальное значение плотности вероятности нахождения частицы равно  $P_m$ . Найти ширину ямы  $l$  и энергию частицы  $E$  в данном состоянии.

2.27. Частица массой  $m$  находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Координаты частицы находятся в пределах  $0 < x < a$ ,  $0 < y < b$ , где  $a$  и  $b$  – стороны ямы. Найти собственные значения энергии и нормированные собственные функции частицы.

2.28. Частица массой  $m$  находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Координаты частицы находятся в пределах  $0 < x < a$ ,  $0 < y < b$ , где  $a$  и  $b$  – стороны ямы. Определить вероятность нахождения частицы с наименьшей энергией в области  $0 < x < a/3$ ,  $0 < y < b/3$ .

2.29. Частица массой  $m$  находится в двумерной квадратной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Сторона ямы равна  $l$ . Найти значения энергии частицы  $E$  для первых четырех уровней.



2.30. Частица массой  $m$  находится в двумерной квадратной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками в основном состоянии. Найти энергию частицы  $E$ , если максимальное значение плотности вероятности нахождения частицы  $-P_m$ .

2.31. Частица массой  $m$  находится в сферически симметричной потенциальной яме:  $U(r) = 0$  при  $r < r_0$  и  $U = \infty$ , если  $r = r_0$ , где  $r_0$  – радиус ямы. Найти возможные значения энергии и нормированные собственные функции, зависящие только от  $r$ . *Указание.* При решении уравнения Шредингера воспользоваться подстановкой  $\psi = \phi/r$ .

2.32. Частица массой  $m$  находится в сферически симметричной потенциальной яме:  $U(r) = 0$  при  $r < r_0$  и  $U = \infty$ , если  $r = r_0$ , где  $r_0$  – радиус ямы. Найти наиболее вероятное значение  $r_{\text{вер}}$  и вероятность  $w$  нахождения частицы в области  $r < r_{\text{вер}}$  в состоянии, зависящем только от  $r$ . Изобразить примерные графики функций  $\psi^2(r)$  и  $r^2\psi^2(r)$ .

2.33. Воспользовавшись решением задачи 2.31, найти средние значения  $\langle r \rangle, \langle r^2 \rangle$  и среднего квадратического отклонения  $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle$  для частицы, находящейся на уровне с номером  $n$ .

2.34. Частица массой  $m$  находится в сферически симметричной потенциальной яме:  $U(r) = 0$  при  $r < r_0$  и  $U = U_0$  при  $r \geq r_0$ , где  $r_0$  – радиус ямы. Найти с помощью подстановки  $\psi = \phi/r$  уравнение, определяющее собственные значения энергии частицы в состоянии, зависящем только от  $r$ , при  $E < U_0$ , и привести это уравнение к виду:

$$\sin kr_0 = \pm kr_0 \sqrt{\hbar^2 / 2mr_0^2 U_0}, \text{ где } k = \sqrt{2mE} / \hbar.$$

Определить интервал значений величины  $r_0^2 U_0$  («мощность» ямы), при которых яма содержит только один уровень энергии.

2.35. Частица массой  $m$  находится в двумерной квадратной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Сторона ямы равна  $l$ . Найти число состояний частицы в интервале энергий  $(E, E + dE)$ , если уровни расположены очень плотно.

2.36. Частица массой  $m$  находится в трехмерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Длины ребер ямы равны  $a, b, c$ . Найти собственные значения энергии частицы.

2.37. Частица массой  $m$  находится в трехмерной кубической потенциальной яме шириной  $l$  с абсолютно непроницаемыми стенками. Найти:

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

2.38. Частица массой  $m$  находится в трехмерной прямоугольной потенциальной яме с абсолютно непроницаемыми стенками. Длины ребер ямы равны  $a, b, c$ . Найти число состояний частицы в интервале энергий  $(E, E + dE)$ , если уровни расположены очень плотно.

2.39. Частица массой  $m$  находится в одномерном потенциальном поле  $U(x)$ , показанном на рис. 2.20, где  $U(0) = \infty$ . Найти уравнение, определяющее возможные значения энергии в области  $E < U_0$ . Привести его к виду

$$\sin kl = \pm kl \sqrt{\hbar^2 / 2ml^2 U_0}, \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar$$

и показать с помощью графического решения этого уравнения, что энергетический спектр является дискретным. Определить минимальное значение величины  $l^2 U_0$ , при котором появится  $n$ -й дискретный уровень.

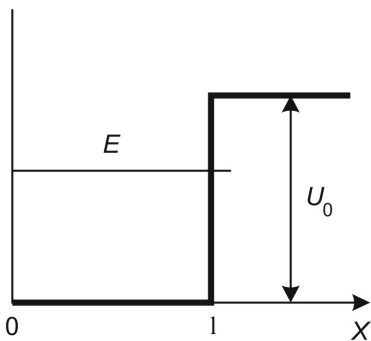


Рис. 2.20

2.40. Частица массой  $m$  находится в одномерном потенциальном поле  $U(x)$ , показанном на рис. 2.20, где  $U(0) = \infty$ . Энергия единственного уровня этой частицы  $E = U_0 / 2$ . Найти значение  $l^2 U_0$  этой ямы и наиболее вероятное значение координаты частицы.

2.41. Частица массой  $m$  находится в одномерной потенциальной яме, конфигурация которой показана на рис. 2.21, где  $U(\pm l) = \infty$ . Показать, что при  $E > U_0$  уравнение, определяющее возможные значения энергии, имеет вид:

$$k_2 \operatorname{tg} k_1 l = -k_1 \operatorname{tg} k_2 l,$$

где  $k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar$ ,

$$k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar.$$

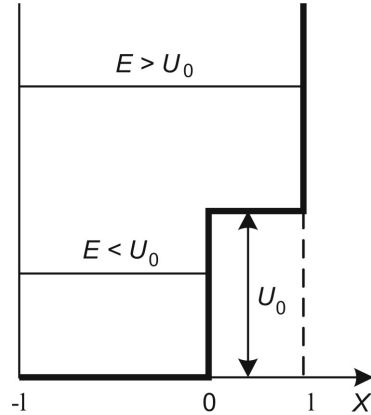


Рис. 2.21

2.42. Частица массой  $m$  находится в одномерной потенциальной яме, конфигурация которой показана на рис. 2.21, где  $U(\pm l) = \infty$ . Показать, что при  $E < U_0$  уравнение, определяющее возможные значения энергии, имеет вид  $\mu \operatorname{tg} kl = -k \operatorname{th} \mu l$ , где  $\mu = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar$ ,  $k = \sqrt{2mE} / \hbar$ ,  $\operatorname{th}$  – гиперболический тангенс.

2.43. Частица массой  $m$  находится в одномерном симметричном потенциальном поле, показанном на рис. 2.22. Найти уравнение, определяющее возможные значения энергии частицы при  $E < U_0$ .

2.44. Частица массой  $m$  находится в одномерной потенциальной яме, конфигурация которой показана на рис. 2.23. Найти энергию основного состояния  $E_1$ , если на краях ямы  $\psi$ -функция вдвое меньше, чем в середине ямы.

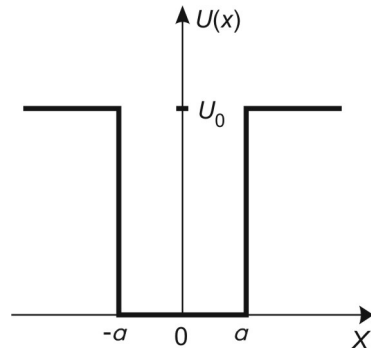


Рис. 2.22

2.45. Электрон находится в одномерной симметричной потенциальной яме шириной  $2a = 2 \cdot 10^{-10}$  м.

Отношение волновой функции основного состояния на границе ямы к ее максимальному значению внутри ямы составляет  $\alpha = 1/2$ . Найти глубину ямы и энергию ионизации.

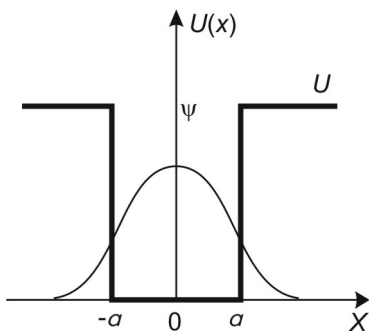


Рис. 2.23

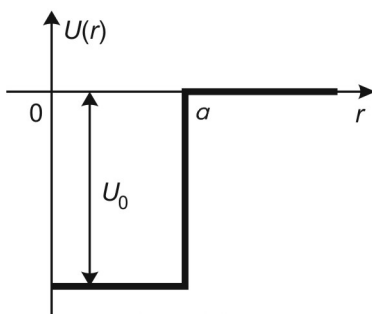


Рис. 2.24

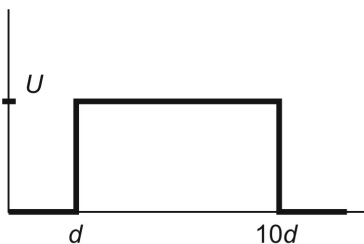


Рис. 2.25

2.46. Найти глубину ямы и энергию ионизации электрона, находящегося в основном состоянии в одномерной яме шириной  $a = 2 \cdot 10^{-10}$  м, для которой  $U(0) = \infty$ ,  $U = -U_0$  при  $0 < x < a$  и  $U = 0$  при  $x > a$ , если известно, что отношение волновой функции на границе ямы ( $x = a$ ) к ее максимальному значению в яме равно  $\alpha = \sqrt{3}/2$ .

2.47. Частица локализована в трехмерной потенциальной яме прямоугольной формы, радиус которой равен  $a$  (рис. 2.24). Определить минимальную глубину ямы  $U_0$ , при которой появится первый уровень энергии. Чему равна энергия частицы на этом уровне?

2.48. Электрон находится в одномерной потенциальной яме, изображенной на рис. 2.25, и имеет энергию  $E = 1,5$  эВ ( $U(0) = \infty$ ). Ширина ямы равна  $d = 3 \cdot 10^{-8}$  см. Найти высоту потенциального барьера  $U$  и его проницаемость  $D$ . За какое время  $\tau$  вероятность найти электрон в яме уменьшится в два раза? Отражением волновой функции на задней границе потенциального барьера пренебречь. Указание. Вероятность распада (проникновения через

барьер) в единицу времени равна произведению числа столкновений частицы со стенкой в единицу времени  $n$  на коэффициент прозрачности  $D$ :  $\lambda = nD$ . Период полураспада  $T = \ln 2 / \lambda$ .

2.49. Электрон находится в одномерной потенциальной яме, изображенной на рис. 2.26, и имеет энергию  $E = 0,9999$  эВ ( $U(0) = \infty$ ).

Высота потенциального барьера  $U = 1$  эВ. Найти ширину ямы, если уровень с указанным значением энергии является первым. Оценить время жизни  $\tau$  электрона в яме. Отражением волновой функции

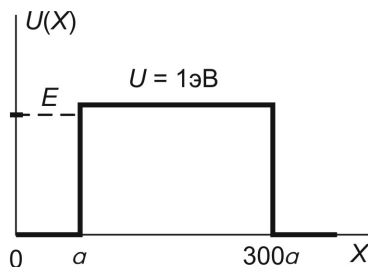


Рис. 2.26

на задней границе потенциального барьера пренебречь.

2.50. При сближении атомов возможен туннельный переход электронов внешних оболочек из одного атома в другой, что приводит к уширению уровней (образованию зон в твердом теле). Считая, что в атоме электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $a = 10^{-10}$  м на глубине, равной энергии ионизации  $U_0 = 10$  эВ, а ширина барьера  $d$  равна среднему расстоянию между атомами ( $d \approx 10^{-10}$  м), оценить энергетическое уширение в кристалле.

2.51. Дейтрон представляет собой ядро дейтерия, состоящее из протона и нейтрона. Энергия связи дейтрона, измеренная экспериментально, составляет  $E = 2,225$  МэВ. Аппроксимируя потенциальную энергию взаимодействия протона с нейтроном с помощью трехмерной прямоугольной потенциальной ямы, определить ее глубину  $U_0$ , при которой возможно такое связанное состояние. Принять радиус потенциальной ямы равным  $l = 1,6 \cdot 10^{-13}$  см.

2.52. Проверить непосредственным интегрированием ортогональность собственных функций частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме.

### 3. ФИЗИКА АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

#### 3.1. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

В механике под гармоническим осциллятором понимают частицу, совершающую гармонические колебания под действием квазиупругой силы  $F = -kx$ . Потенциальная энергия такой частицы имеет вид  $U = 1/2 kx^2$ , где  $k$  – жесткость пружины,  $x$  – смещение от положения равновесия. В дальнейшем более удобным оказывается представление потенциальной энергии в виде  $U = 1/2 m\omega^2 x^2$ , где  $m$  – масса частицы,  $\omega$  – частота осциллятора. К задаче о гармоническом осцилляторе можно свести, например, задачу о колебаниях атомов твердого тела около положения равновесия.

Уравнение Шредингера для такого гармонического осциллятора будет иметь следующий вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (3.1)$$

Найдем собственные функции  $\psi$  и собственные значения энергии  $E$ . Точное решение данного уравнения выражается через так называемые полиномы Эрмита. Мы же попытаемся сделать иначе. При больших  $x$  значении энергии  $E$  можно пренебречь, и тогда уравнение (3.1) примет вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \text{const} x^2 \psi. \quad (3.2)$$

Легко проверить, что уравнению (3.2) удовлетворяет функция вида

$$\psi = \exp(-\alpha x^2). \quad (3.3)$$

Поэтому попробуем искать решение уравнения (3.1) в виде (3.3). После дифференцирования  $\psi$  и подстановки в (3.1) получаем:

$$\psi(-2\alpha + 4\alpha^2 x^2) = \left( -\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi.$$

Для того чтобы данное соотношение было тождеством при любых  $x$ , необходимо выполнить равенства:

$$2\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad 4\alpha^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}.$$

Из них находим значение параметра  $\alpha$  и энергии осциллятора  $E$ :

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}, \quad E = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Таким образом, одной из собственных функций гармонического осциллятора является

$$\psi_0(x) = \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right).$$

Легко убедиться, что  $\psi_0$  является далеко не единственным решением уравнения Шредингера. Функция  $\psi_1(x) = x\psi_0(x) = x\exp(-m\omega x^2/2\hbar)$  также является решением, но при  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ .

Это означает, что квантовый осциллятор, находящийся в потенциальной яме, может находиться в различных состояниях, характеризующихся набором волновых функций  $\psi_n(x)$ . С этим мы уже знакомы! Причем каждой волновой функции соответствует свое значение энергии  $E$ . В общем случае энергия гармонического осциллятора принимает дискретные (квантованные) значения:

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Состояние с  $n = 0$  – основное (невозбужденное) с минимальной энергией  $E_0$ , остальные состояния – возбужденные. Расстояние между соседними уровнями энергии:

$$\Delta E = \hbar\omega.$$

При переходах осциллятора из одного состояния в другое происходит либо испускание, либо поглощение фотона. В квантовой теории доказывается, что квантовое число  $n$  осциллятора при поглощении или излучении фотона может меняться только на  $\pm 1$ , т.е.  $\Delta n = \pm 1$  (в этом заключается правило отбора). Это означает, что вероятность переходов на не соседние уровни равна

нулю, и тогда энергия фотона всегда  $\varepsilon = \hbar\omega$ . Все это полностью соответствует гипотезе Планка. Как и в случае с прямоугольной потенциальной ямой, квантование энергии здесь связано с финитностью движения частицы в силовом поле.

## 3.2. ПРИМЕНЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА К АТОМУ ВОДОРОДА

Рассмотрим водородоподобную систему: ядро с зарядом  $+Ze$  и электрон (при  $Z=1$  получаем атом водорода,  $Z$  – порядковый номер элемента по таблице Менделеева).

В этом случае энергия взаимодействия электрона с ядром в системе СИ имеет вид:

$$U(r) = -kZe^2 / r \quad (k = 1/4\pi\varepsilon_0).$$

Тогда уравнение Шредингера запишем как

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E + k \frac{Ze^2}{r}) \psi = 0.$$

Волновая функция в общем случае зависит уже от трех пространственных координат. Естественно рассматривать сферическую систему координат –  $r, \theta, \varphi$  (рис. 1.4). Рассмотрим частный случай, когда волновая функция электрона в атоме сферически симметрична, т.е. зависит только от расстояния до ядра  $r$ . Такой случай не предусматривался старой теорией Бора. В ней всякое движение электрона вокруг ядра происходило по плоским орбитам и, естественно, не могло быть сферически симметричным. Но так как в квантовой механике нет представлений о движении по орбитам, то нет и препятствий для реализации сферически симметричных состояний.

Оператор Лапласа в сферической системе координат имеет вид:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \Phi(\theta, \varphi),$$

где  $\Phi(\theta, \varphi)$  представляет «угловую» часть  $\nabla^2$ , зависящую как от углов, так и от производных по ним. Перепишем теперь уравнение Шредингера:



$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2} \Phi \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E + k \frac{Ze^2}{r}) \psi = 0.$$

Попытаемся найти собственные функции и собственные значения энергии без «лишней крови». Так как электрон не может находиться в ядре, то существует состояние, в котором электрон находится наиболее близко к ядру, и это состояние обладает наименьшей энергией. Во-вторых, это состояние должно быть сферически симметричным (самое простое состояние), т.е. не должно зависеть от углов. В этом случае уравнение Шредингера приобретает вид:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial \psi(r)}{\partial r}) = - \frac{2m}{\hbar^2} (E + k \frac{Ze^2}{r}) \psi(r). \quad (3.4)$$

В качестве решения попробуем для начала взять просто экспоненту  $\psi(r) = \exp(-r/r_0)$ , где  $r_0$  – некоторая константа, смысл которой выясним позднее.

После подстановки предполагаемого решения в уравнение (3.4) и сокращения на экспоненту приходим к уравнению

$$\frac{1}{r^2} (\frac{r^2}{r_0^2} - \frac{2r}{r_0}) = - \frac{2m}{\hbar^2} (E + k \frac{Ze^2}{r}).$$

Приравнивая члены при одинаковых степенях  $r$ , включая нулевую, получаем:

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{kmZe^2} \text{ и } E = - \frac{Z^2 k^2 m e^4}{2\hbar^2}.$$

Таким образом, экспонента на самом деле является решением при правильном выборе  $r_0$  и  $E$ . Знак минус в выражении для энергии показывает, что это – энергия притяжения электрона к ядру. Иначе электрон просто улетит от ядра, а это уже не атом. После подстановки значений  $m, k, e, \hbar$  для  $Z = 1$  находим  $E = E_i = -13,6$  эВ ( $E_i$  – энергия ионизации, т.е. минимальная энергия, необходимая для удаления электрона из атома водорода). Ну а теперь попытаемся понять смысл постоянной  $r_0$ . Для этого найдем вероятность обнаружить электрон в интервале  $dr$ :

$$dP = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 4\pi r^2 dr = W(r)dr ,$$

где  $W(r) = 4\pi r^2 \exp(-2r/r_0)$  – плотность вероятности обнаружить электрон на расстоянии  $r$  от ядра. График функции  $W(r)$  представлен на рис. 3.1. Легко проверить, что максимум плотности вероятности приходится как раз на значение  $r = r_0 = \hbar^2 / kme^2 = 5 \cdot 10^{-11} \text{ м}$ . Таким образом,  $r_0$  является наиболее вероятным положением электрона в невозбужденном атоме водорода – боровский радиус.

Следующие состояния электрона находятся аналогично, и для них получается  $E_2 = E_1 / 4$ ,  $E_3 = E_1 / 9$  и так далее. В общем случае энергия электрона в водородоподобном атоме определяется выражением:

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2 k^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3 \dots - \text{главное квантовое число}).$$

Схема уровней энергии электрона в атоме водорода представлена на рис. 3.2.

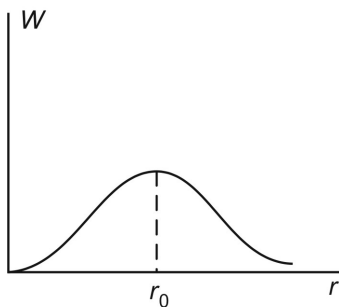


Рис. 3.1

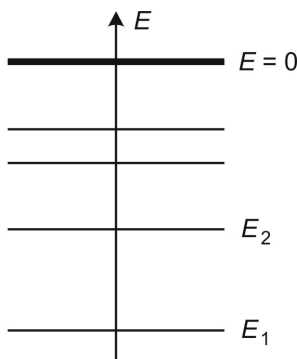


Рис. 3.2

### 3.3. ПРОСТРАНСТВЕННОЕ КВАНТОВАНИЕ

При решении задачи о частице в потенциальной яме мы имели дело с одной координатой. Это привело к появлению одного квантового числа. В атоме водорода электрон движется в трехмерном пространстве, т.е. имеет три степени свободы. Следует ожидать, что это приведет к трем квантовым числам. Одно из этих чисел мы уже

знаем – это главное квантовое число  $n$ . Два других квантовых числа связаны с квантованием момента импульса частицы и его проекции.

Попытаемся вначале найти проекцию момента импульса  $L_z$ . Ранее было показано, что собственные значения  $L_z$  удовлетворяют уравнению:

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi, \quad \text{или} \quad -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi.$$

Легко сообразить, что  $\psi = \exp(\alpha\varphi)$ , где  $\alpha$  – некоторая константа. Подставляя это выражение в уравнение для момента импульса, получаем

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \exp(\alpha\varphi) = L_z \exp(\alpha\varphi).$$

После сокращения на экспоненту находим  $\alpha = \frac{iL_z}{\hbar}$ . Таким образом, волновая функция должна иметь вид:

$$\psi = \text{const} \exp\left(\frac{iL_z}{\hbar} \varphi\right).$$

Так как волновая функция должна быть однозначной, то необходимо выполнить условие  $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ , или

$$\exp\left(\frac{iL_z}{\hbar} \varphi\right) = \exp\left(\frac{iL_z}{\hbar} (\varphi + 2\pi)\right).$$

А это будет выполнено, если  $\frac{L_z}{\hbar} = m$ , где  $m$  – некоторое целое число, равное  $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .

Таким образом, для проекции момента импульса на некоторое направление получаем выражение:

$$L_z = m\hbar, \quad \text{где } m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots,$$

т.е. проекция момента импульса на выделенное в пространстве направление принимает квантованные значения, кратные постоянной Планка,  $m$  называется магнитным квантовым числом. Кроме того, очевидно, что если квантуется проекция  $L$ , то квантуется и само значение  $L$ . Доказательство квантования момента импульса

достаточно затруднительно, поэтому приведем только окончательный результат:

$$L_l = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$l$  называется орбитальным (азимутальным) квантовым числом. Очевидно, что максимальное значение  $m = l$  и, как следствие,  $L_z < L$ . Отсюда следует своеобразный вывод: вектор момента импульса не может совпадать ни с одним выделенным в пространстве направлением, т.е. «вектор» момента импульса не имеет определенного направления и, следовательно, не может отображаться, как в классической механике, направленным отрезком прямой. Поясним это. Пусть  $l = 2$ . Тогда

$$L = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \quad L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar.$$

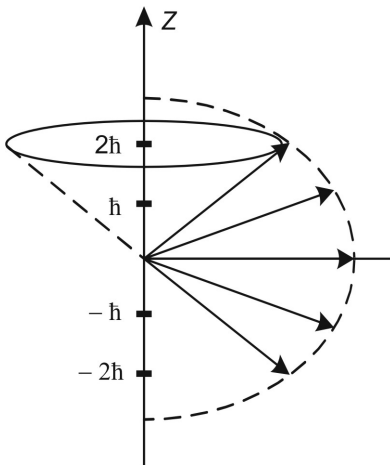


Рис. 3.3

Вектор момента импульса может занимать любое положение в пространстве вдоль образующей конуса и не может быть направлен по оси  $Z$  (рис. 3.3). Этот рисунок нельзя понимать буквально. Он правильно передает только два факта: возможные значения проекции и возможные значения модуля момента импульса. Из квантования момента импульса следует, что постоянную Планка можно рассматривать как естественную единицу измерения проекции момента импульса.

### 3.4. ОПЫТ ШТЕРНА И ГЕРЛАХА. СПИН ЭЛЕКТРОНА

Экспериментальное подтверждение квантования момента импульса было осуществлено Штерном и Герлахом. Момент импульса электрона, связанный с механическим движением электрона, неизбежно приводит к наличию у атомов магнитного

момента. Поэтому, если квантуется момент импульса, то неизбежно должен квантоваться и магнитный момент.

В опытах Штерна и Герлаха пучок атомов пропусклся через сильно неоднородное магнитное поле полюсных наконечников электромагнита специальной формы (рис. 3.4). В этом случае на пучок атомов должна действовать отклоняющая сила, пропорциональная магнитному моменту и, соответственно, механическому моменту импульса.

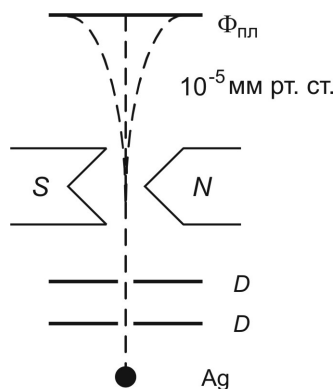


Рис. 3.4

При хаотическом распределении магнитных моментов в пучке атомов предполагалось, что узкий пучок атомов после прохождения между полюсами магнитов образует на экране сплошной растянутый след. Опыт дал неожиданные результаты. Вместо сплошного растянутого следа получались резкие отдельные линии, расположенные симметрично относительно следа пучка, полученного в отсутствие поля. Это можно было объяснить только квантованием момента импульса.

В первоначальных опытах применялись пучки атомов серебра. В магнитном поле пучок расщеплялся на две составляющие. То же происходило и с атомами водорода. Для атомов других химических элементов наблюдалась и более сложная картина расщепления, однако число расщепленных пучков получалось не только нечетным, что предсказывалось квантовой теорией, но и четным — что противоречило ей.

Кроме того, в опытах Штерна и Герлаха атомы водорода находились в основном состоянии с  $n = 1$ , т.е. не обладали орбитальными моментами. То же самое относится и к опытам с атомами серебра. Атом серебра имеет единственный наружный электрон. Атомный остов, ввиду его симметрии, не обладает ни орбитальным, ни магнитным моментами. Весь магнитный момент атома серебра создается только одним наружным электроном. И если атом находится в нормальном состоянии, его орбитальный момент в целом тоже равен нулю. Тогда естественным образом возникает вопрос: пространственное квантование какого момента импульса обнаружи-

лось в этих опытах? Для объяснения этого результата и других Гаудсмит и Уленбек выдвинули предположение, что электрон имеет собственный механический и связанный с ним магнитный момент. Этот собственный момент импульса назвали спином электрона. Это некоторое собственное свойство, подобное массе, заряду. Вначале предполагали, что спин связан с вращением электрона вокруг собственной оси, но затем это предположение пришлось по ряду причин отвергнуть.

Спин рассчитывается по формуле

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

где  $s$  называется спиновым квантовым числом и равно  $1/2$ . Проекция спина на выделенное направление:

$$L_{sz} = m_s \hbar, m_s = \pm 1/2.$$

Принято говорить, что спин электрона имеет только два направления: по полю и против поля. В дальнейшем выяснилось, что спином обладают и другие элементарные частицы (нуклоны, фотоны и др.). Более подробно о спине речь пойдет далее.

### 3.5. КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА. КРАТНОСТЬ ВЫРОЖДЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

Вернемся к атому водорода. Собственные функции уравнения Шредингера содержат три целочисленных параметра  $n, l, m$ , то есть  $\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ . Параметр  $n$ , называемый **главным квантовым числом**, совпадает с номером уровня энергии. Параметры  $l$  и  $m$  представляют **азимутальное и магнитное квантовые числа**, определяющие модуль момента импульса и его проекцию на некоторое направление  $Z$ . При заданном  $n$  квантовое число  $l$  для электрона в водородоподобном атоме ограничено и может принимать  $n$  различных значений:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

В свою очередь, при данном  $l$  квантовое число  $m$  может принимать  $2l+1$  различных значений:

$$m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l.$$

Энергия электрона в атоме водорода зависит только от главного квантового числа. Следовательно, каждому значению  $E_n$  (кроме  $E_1$ ) соответствует несколько собственных функций  $\psi_{nlm}$ , отличающихся значениями квантовых чисел  $l$  и  $m$ . Это означает, что атом водорода может иметь одно и то же значение энергии, находясь в нескольких различных состояниях. Состояния с одинаковой энергией называются **вырожденными**, а число различных состояний с каким-либо значением энергии – **кратностью вырождения** соответствующего энергетического уровня. Легко сообразить, что кратность вырождения  $Z_n$  можно рассчитать по формуле:

$$Z_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

Состояние электрона принято обозначать следующим образом:

$l = 0$  –  $s$ -электрон ( $s$ -состояние),

$l = 1$  –  $p$ -электрон ( $p$ -состояние),

$l = 2$  –  $d$ -электрон ( $d$ -состояние),

$l = 3$  –  $f$ -электрон ( $f$ -состояние), затем идут  $g$ -,  $h$ -состояния и т.д. Значение главного квантового числа указывается перед условным обозначением квантового числа  $l$ . Например, электрон в состоянии с  $n = 3$ ,  $l = 1$  обозначают символом  $3p$ . Таким образом, возможны следующие состояния электрона в атоме водорода:

$1s$

$2s, 2p$

$3s, 3p, 3d$

$4s, 4p, 4d, 4f$  и так далее.

### 3.6. СПЕКТРЫ ИЗЛУЧЕНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

Ранее схему уровней энергии атома водорода мы отображали так, как показано на рис. 3.2. Однако гораздо удобнее применять другую схему (рис. 3.5), которая частично отражает характер вырождения различных уровней энергии. Кроме того, данная схема позволит отразить и возможные переходы электрона между различными состояниями.

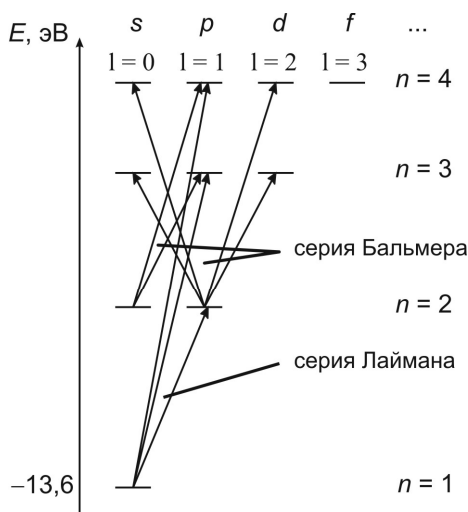


Рис. 3.5

Испускание и поглощение света происходит при переходах электрона с одного уровня на другой. При этих переходах происходит либо испускание фотона, либо его поглощение. Фотон обладает собственным моментом импульса (спином), равным постоянной Планка. Поэтому закон сохранения момента импульса требует, чтобы момент импульса электрона при каждом акте испускания или поглощения фотона изменялся на  $\hbar$ . А это означает,

что при каждом переходе электрона с одного уровня энергии на другой азимутальное квантовое число должно изменяться на единицу. Отсюда следует так называемое правило отбора:

$$\Delta l = \pm 1.$$

На рис. 3.5 показаны переходы, соответствующие спектрам поглощения и разрешенные этим правилом. Серия Лаймана (ультрафиолет) возникает при переходах:  $np \rightarrow 1s$  ( $n = 2, 3, 4, \dots$ ). Серия Бальмера (видимая) возникает при переходах:  $ns \rightarrow 2p, nd \rightarrow 2p$  ( $n = 3, 4, 5, \dots$ ). Такому же правилу подчиняются и следующие серии (Пашена, Брэкета и т.д.)

Состояние  $1s$  – основное (невозбужденное). В этом состоянии атом обладает наименьшей энергией. Для перехода в возбужденное состояние ему необходимо сообщить энергию – либо за счет теплового соударения с соседями (после этого при обратном переходе нагретые тела светятся), либо за счет столкновения атома с достаточно быстрым электроном (газовый разряд), либо за счет поглощения атомом фотона. При этом спектр поглощения водородного атома должен состоять из линий, соответствующих переходам:  $1s \rightarrow np$  ( $n = 2, 3, 4, \dots$ ). Этот результат полностью соответствует опыту.



### 3.7. СПЕКТРЫ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Спектры поглощения и испускания атомов щелочных металлов в основном похожи на спектры атома водорода. Это означает, что эти спектры возникают при переходах самого внешнего (валентного или оптического) электрона с одного уровня на другой. На рис. 3.6 в качестве примера представлена схема спектров поглощения атомов натрия (причину того, что схема начинается с  $n = 3$ , поймем позднее – это связано с т.н. принципом запрета Паули).

Отличие же этих спектров от спектров водорода заключается в том, что аналогичные уровни в различных рядах, отличающихся квантовым числом  $l$ , лежат на неодинаковой высоте. А это означает, что энергия состояния электрона зависит не только от главного квантового числа  $n$ , но и от азимутального квантового числа  $l$ , т.е. от момента импульса электрона, чего не было для атома водорода! Связано это с тем, что в более сложных

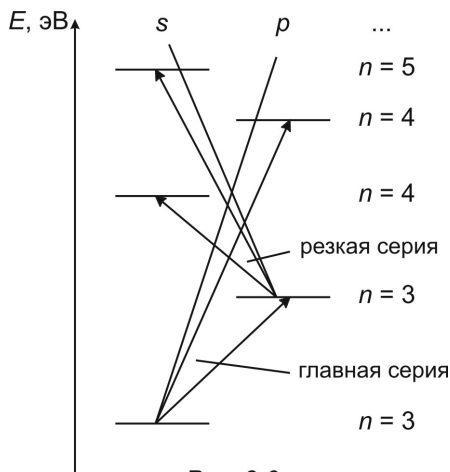


Рис. 3.6

атомах каждый электрон движется в усредненном поле ядра и остальных электронов. Это поле зависит от расстояния не по закону  $1/r^2$ , но обладает центральной симметрией. По мере проникновения электрона в глубь атома заряд ядра экранируется другими электронами, а это приводит к тому, что энергия начинает зависеть не только от главного квантового числа, но и от азимутального. Формально это означает, что снимается вырождение по азимутальному квантовому числу. Причем с ростом  $l$  энергия для одинаковых значений  $n$  также растет. Более того, момент импульса атомного остатка (ядро плюс остальные электроны, кроме наименее связанного валентного) равен нулю.

При возбуждении атома щелочного металла и при испускании им света изменяется только состояние валентного электрона. Значит,

для него действует правило отбора  $\Delta l = \pm 1$ , и схему уровней энергии атомов щелочных металлов можно считать тождественной схеме уровней валентного электрона.

### 3.8. МУЛЬТИПЛЕТНОСТЬ СПЕКТРОВ И СПИН ЭЛЕКТРОНА

Точные экспериментальные исследования спектров щелочных металлов показали, что каждая линия этих спектров является двойной (дублет). Структура спектра, отражающая расщепление линий на компоненты, называется тонкой структурой. Сложные линии, состоящие из нескольких компонентов, получили название «мультиплеты» (дублеты, триплеты, квартеты, квинтеты...). Одиночные линии – синглеты.

Для объяснения расщепления спектральных линий и результатов других опытов (вспомним опыт Штерна и Герлаха), как уже упоминалось ранее, Гаудсмит и Уленбек (1925 г.) выдвинули гипотезу о том, что электрон, кроме орбитального момента импульса, обладает также собственным моментом импульса – спином.

Классический вариант момента импульса при движении по окружности:  $L = rm\vartheta$ . Кроме того, электрон как движущийся по замкнутой кривой заряд (рис. 3.7) обладает магнитным момен-

том:  $p_m = JS = \frac{e}{T} \pi r^2$  (здесь  $T$  – период обращения электрона по орбите радиуса  $r$  со скоростью  $\vartheta$ ). Учитывая, что  $T = 2\pi r/\vartheta$ , получаем выражение для орбитального магнитного момента  $p_m = e\vartheta r/2$ . Выражение  $p_m/L$  называется гиромагнитным отношением. Для

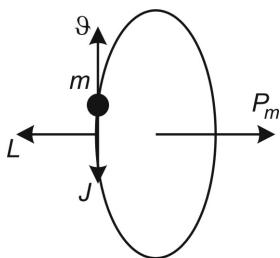


Рис. 3.7

электрона  $p_m/L = -\frac{e}{2m}$  (знак минус показывает, что направления векторов  $p_m$  и  $L$  противоположны).

По идее Гаудсмита и Уленбека, электрон должен обладать также собственным механическим моментом импульса –  $L_s$  и магнитным моментом –  $\mu_s$ . Причем отношение  $\mu_s/L_s$  оказалось в два раза больше, чем должно было быть по классическим представлениям:  $\mu_s/L_s = -e/m$ .

Предположение о спине электрона было подтверждено большим количеством опытных фактов и считается совершенно доказанным. Кроме того, спин электрона и все его свойства автоматически вытекают из уравнения Дирака, которое является релятивистским вариантом уравнения Шредингера. Таким образом, спин электрона является одновременно и квантовым, и релятивистским свойством.

Величина собственного момента импульса определяется спиновым квантовым числом  $s = 1/2$

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\hbar \sqrt{3}}{2}.$$

Проекция спина на заданное направление также принимает квантованные значения

$$L_{sz} = m_s \hbar = \pm \hbar / 2.$$

Найдем магнитный момент электрона:

$$\mu_s = -\frac{e}{m} L_s = -\frac{e\hbar}{m} \sqrt{s(s+1)} = -\frac{e\hbar}{2m} \sqrt{3}.$$

Величину  $\frac{e\hbar}{2m}$  обозначают как  $\mu_B$  (магнетон Бора).

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 0,93 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Т.}$$

Проекция собственного магнитного момента электрона на заданное направление

$$\mu_{sz} = -\frac{e}{m} L_{sz} = -\frac{e}{m} (\pm \frac{\hbar}{2}) = \pm \mu_B.$$

Наличие спина легко объясняет мультиплетную структуру спектров. Рассмотрим, например, натрий. Позднее мы докажем, что суммарный момент импульса всех электронов натрия, кроме валентного, равен нулю. Это означает, что момент импульса атома натрия равен моменту импульса валентного электрона. Полный момент импульса складывается из орбитального и собственного:

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

где  $j$  – квантовое число, которое может принимать следующие значения:

$$j = l + s, |l - s|,$$

$l$  – азимутальное квантовое число,  $s$  – спиновое квантовое число. При  $l = 0$  квантовое число  $j$  принимает только одно значение:  $j = s = 1/2$ . При  $l \neq 0$  возможны два значения:  $j = l + 1/2$ ,  $j = l - 1/2$ , которые соответствуют двум возможным ориентациям моментов импульса – «параллельной» и «антипараллельной». Т.е. в зависимости от ориентации спина механический момент импульса может принимать несколько значений. А т.к. с этим связан магнитный момент, то возможны и различные значения магнитных моментов. Энергия магнитного взаимодействия (его еще называют спин-орбитальное) зависит от взаимной ориентации орбитального и собственного момента импульса. Значит, состояния с различными значениями квантового числа  $j$  должны обладать и различной энергией.

Обусловленное спином расщепление энергетических уровней является релятивистским эффектом. Релятивистская квантовая теория дает для расстояния между уровнями тонкой структуры водородного атома значение:

$$\Delta E = \frac{\alpha^2}{16} E_i,$$

где  $E_i$  – энергия ионизации,  $\alpha$  – так называемая постоянная тонкой структуры, ее значение в гауссовой системе равно  $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137$ . Постоянная тонкой структуры характеризует энергию взаимодействия двух электронов, или как сильно электрон связан с электромагнитным полем. Т.к. в выражение для  $\alpha$  не входит масса электрона, то  $\alpha$  является константой связи с электромагнитным полем для любой элементарной частицы с зарядом  $e$ .

### 3.9. ПРИНЦИП ПАУЛИ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ОБОЛОЧКИ

Состояние электрона в атоме определяется четырьмя квантовыми числами:

главное  $n = 1, 2, 3, \dots$  – определяет энергию электрона (главным образом),

орбитальное  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  – определяет модуль момента импульса,

магнитное  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  – определяет проекцию момента импульса,

спиновое  $m_s = \pm 1/2$  – определяет проекцию спина на заданное направление.

Энергия состояния зависит в основном от чисел  $n$  и  $l$ . Кроме того, существует слабая зависимость энергии от чисел  $m_l$  и  $m_s$  (спин-орбитальное взаимодействие). Но, как правило, состояния с бóльшим значением  $n$  обладают независимо от  $l$  бóльшей энергией.

В нормальном (невозбужденном) состоянии электроны должны располагаться на самых низких доступных для них энергетических уровнях. Поэтому, казалось бы, в любом атоме в нормальном состоянии все электроны должны находиться в состоянии  $1s (n=1, l=0)$ . Однако опыт показывает, что это не так. Объяснение наблюдаемых закономерностей излучения атомов было найдено Паули, который сформулировал принцип запрета: **в одном и том же атоме (любой квантовой системе) не может быть двух электронов, обладающих одинаковой совокупностью четырех квантовых чисел.** Или, другими словами, **в одном и том же состоянии не могут находиться одновременно два электрона.**

Ранее было показано, что каждому значению главного квантового числа  $n$  соответствует  $n^2$  состояний, отличающихся значениями  $l$  и  $m$ . Кроме того, нужно учесть, что в одном состоянии могут находиться два электрона с разными спинами. Поэтому в состоянии с данным квантовым числом  $n$  в атоме могут находиться  $Z_n = 2n^2$  электронов. Итак, в состоянии с  $n=1$  могут находиться только два электрона,  $n=2$ –8 электронов,  $n=3$ –18 электронов и т.д.

Совокупность электронов, имеющих одинаковое значение главного квантового числа  $n$ , образует так называемую оболочку:

значение $n$	1	2	3	4	5	6	...
обозначение оболочки	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>O</i>	<i>P</i>	...

Для полностью заполненной оболочки суммарный момент импульса всегда равен нулю.

### 3.10. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ МЕНДЕЛЕЕВА

Принцип Паули позволяет объяснить расположение элементов в таблице Менделеева.

Первый элемент – водород. Каждый последующий атом будем получать, увеличивая заряд ядра на единицу и добавляя один электрон, который будем помещать согласно принципу Паули в соответствующую оболочку с наименьшей энергией.

Структура водорода обсуждалась ранее. Единственный электрон находится в состоянии с  $n = 1$ , так называемый  $1s$ -электрон с произвольной ориентацией спина. Энергия ионизации (энергия связи) для водорода составляет 13,6 эВ.

Следующий элемент – гелий. Рассмотрим вначале ион  $\text{He}^+$ , состоящий из ядра (2 протона и 2 нейтрона) плюс 1 электрон – водородоподобный атом. Для него работает формула:

$$E_n = 13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{Эв}.$$

Его ионизационный потенциал ( $Z = 2$ ) равен

$$E_i = 13,6 \frac{2^2}{1} = 54,4 \text{Эв}.$$

Опыт дает такое же значение. Поместим теперь в окрестности  $\text{He}^+$  второй электрон. Вначале (рис. 3.8) он «видит» заряд +1,

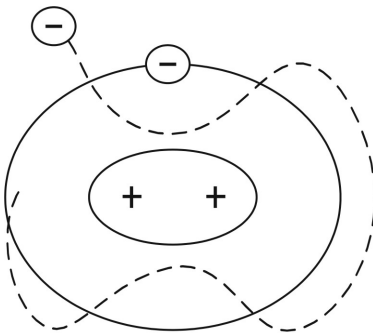


Рис. 3.8

затем, попав в  $K$ -оболочку, половину времени он будет «видеть» заряд  $Z = +1$ , а другую половину времени – заряд  $Z = +2$ . Возьмем среднее значение  $Z_{\text{эфф}} = 1,5$ . Для энергии ионизации получаем:

$$E_i = 13,6 Z_{\text{эфф}}^2 / n^2 = 30 \text{Эв}.$$

Однако из-за отталкивания электронов между собой должно быть несколько меньше, чем 30 эВ. Опыт дает:  $E_i = 24,6$  эВ. Это самый

большой потенциал ионизации среди всех элементов. Из-за высокого ионизационного потенциала и отсутствия места в *K*-оболочке для 3-го электрона гелий химически крайне инертен. Химические силы не в состоянии обеспечить энергию 24,6 Эв, чтобы образовать  $\text{He}^+$ . Если же попытаться добавить третий электрон, то он должен оказаться уже в *L*-оболочке с  $n = 2$ . А это слишком далеко от ядра, и  $Z_{\text{эфф}} = 0$ ! Поэтому гелий не образует молекул ни с одним элементом – благородный газ. Электронная конфигурация –  $1s^2$  (два  $1s$  электрона со спинами противоположного направления). На атоме гелия заканчивается заполнение *K*-оболочки.

Затем идет литий ( $Z = 3$ ). В нейтральном атоме Li третий электрон должен располагаться в *L*-оболочке с  $n = 2$ . Для него  $Z_{\text{эфф}} = 1$ . Его ионизационный потенциал равен примерно  $13,6 \cdot 1^2 / 2^2 = 3,4$  В (эксперимент дает 5,4 В). Но второй ионизационный потенциал (т.е. удаление второго электрона, для которого  $Z_{\text{эфф}} = 2,5$  и  $n = 1$ ) равен 76 В! Именно поэтому литий в соединениях обнаруживает валентность +1 (т.е. теряет один электрон) и никогда не обнаруживает валентность +2. Электронная конфигурация  $1s^2 2s$ .

Достройка *L*-оболочки идет до Ne. У него заполнены *K*- и *L*-оболочки полностью. Ионизационный потенциал у Ne очень высок, но ниже, чем у гелия; Ne – тоже инертный газ.

Затем вплоть до Ar (начиная с Na) заполняется *M*-оболочка (вакансий в ней 18). Чтобы получить калий, нужно добавить заряд +1 и еще один электрон – 19-й. По идее, его нужно поместить в недостроенную *M*-оболочку, но он помещается уже в *N*-оболочке. Дело в том, что состояние с недостроенной *M*-оболочкой из-за взаимодействия электронов между собой обладает меньшей энергией, чем достройка *M*-оболочки до конца, т.к. энергия электронов зависит не только от главного квантового числа, но и от других.

Подобная картина соблюдается и в дальнейшем. Таким образом, периодичность химических свойств элементов связана с повторяемостью электронных конфигураций во внешних электронных оболочках.

### 3.11. МЕХАНИЗМЫ ОБРАЗОВАНИЯ МОЛЕКУЛ

Существует два типа сильной связи атомов в молекулах – ионная и ковалентная.

**Ионная связь.** Если два нейтральных атома постепенно сближать друг с другом, то наступает момент, когда внешний электрон одного из атомов предпочитает присоединиться к другому атому. Атом, потерявший электрон, приобретает заряд  $+1$ , а приобретший электрон получает заряд  $-1$ . В этом случае начинает проявляться потенциальная энергия электростатического взаимодействия между ними. Это и приводит к образованию молекул с ионной связью. Переход электрона от атома к атому повышает энергию их обоих, но за счет понижения энергии электростатического взаимодействия на малых расстояниях такое состояние оказывается энергетически более выгодным. При дальнейшем сближении атомов их энергия начинает снова расти благодаря отталкиванию внутренних электронов атомов.

**Ковалентная связь.** Эта связь проявляется в основном у органических соединений. Она образуется, когда электроны становятся коллективной собственностью двух и более атомов. Простейший пример – молекула  $H_2$ . Рассмотрим сначала ионизованную молекулу  $H_2^+$  (рис. 3. 9). Энергия связи электрона в присутствии двух протонов больше, чем для одного протона. Электростатическое взаимодействие протонов стремится разорвать эту связь. Однако за счет экранирования электронным облаком положительных зарядов преобладающим становится притяжение электрона к обоим протонам.

Кроме того, есть вакансии еще для одного электрона. Если ее заполнить, то получится уже нейтральная молекула  $H_2$ . Из-за отталкивания электронов между собой их волновая функция оказывается более размытой; это приводит к увеличению размеров молекулы  $H_2$ .

Зависимость энергии взаимодействия атомов аналогична ионной связи.

Точно такая же картина наблюдается для углерода. Но он имеет тенденцию обобществлять 4 дополнительных электрона, чтобы дозаполнить  $L$ -оболочку с  $n = 2$ . Так образуется, например, метан  $CH_4$ .

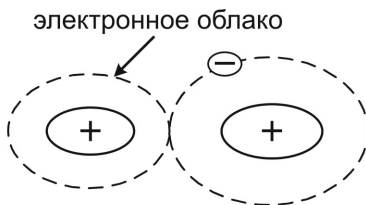


Рис. 3.9



### 3.12. ИНДУЦИРОВАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Мы знаем два вида переходов атомов между энергетическими уровнями (рис. 3.10):

- 1) спонтанные (самопроизвольные) переходы с более высоких уровней на более низкие;
- 2) вынужденные переходы с более низких уровней на более высокие под действием излучения.



Рис. 3.10

Вероятность испускательных переходов первого типа зависит от внутренних свойств атомов и не зависит от интенсивности падающего излучения. Эти переходы происходят спонтанно (самопроизвольно) и потому называются спонтанными переходами.

Вероятность переходов второго типа («поглощательных») зависит как от свойств атомов, так и от интенсивности падающего излучения.

Этих двух видов переходов, как показал Эйнштейн, недостаточно для объяснения существования равновесия между излучением и веществом (излучает «сколько хочет», поглощает «сколько дадут»).

Для возможности установления равновесия между излучением и поглощением фотонов веществом необходимо, чтобы энергия излучения была пропорциональна энергии поглощения (как и при тепловом излучении). А это означает, что должны быть так называемые «испускательные» переходы, вероятность которых возрастала бы с увеличением интенсивности падающего излучения. Возникающее при этом излучение называется **индуцированное** (вынужденное). Причем вероятность переходов, сопровождающихся излучением, должна быть равна вероятности переходов, сопровождающихся поглощением.

Индукцированное излучение обладает рядом замечательных свойств. Направление его распространения в точности совпадает с направлением распространения вынуждающего излучения, вызвавшего переход. То же самое относится к частоте, фазе и поляризации вынужденного и вынуждающего излучений, т.е. **индуцированное и падающее излучения строго когерентны**. Эта особенность лежит в основе действия лазеров – усилителей и генераторов света. По существу, индуцированное излучение оптических квантовых генераторов представляет собой макроскопический квантовый эффект.

### 3.13. ПРИНЦИП УСИЛЕНИЯ СВЕТА С ПОМОЩЬЮ ВЫНУЖДЕННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Если частота падающего на вещество света совпадает с одной из частот  $\omega = (E_n - E_m)/\hbar$  атомов вещества при  $n > m$ , то могут происходить два процесса:

1) вынужденный переход  $m \rightarrow n$  – поглощение света,

2) вынужденный переход  $n \rightarrow m$  – усиление интенсивности падающего пучка,

т.е. происходит либо поглощение, либо усиление света. Результат зависит от того, какой из этих процессов преобладает.

Пусть система находится в термодинамическом равновесии. В этом случае распределение атомов по энергии можно описать законом Больцмана:

$$N_n = C \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right),$$

где  $N_n$  – число атомов, имеющих при температуре  $T$  энергию  $E_n$ .

Число переходов  $n \leftrightarrow m$  пропорционально населенности этих уровней, т.е. числу атомов на данном уровне. Поэтому в системе, находящейся в термодинамическом равновесии, поглощение падающего света преобладает над вынужденным излучением.

**Для получения усиления падающего излучения необходимо сделать так, чтобы в состоянии с большей энергией было больше атомов, чем в состоянии с меньшей энергией, т.е. осуществить инверсную населенность уровней.**

Такая система обладает рядом интересных свойств. Рассмотрим, например, отношение чисел атомов, обладающих разной энергией  $N_n / N_m$ . В силу распределения Больцмана имеем:

$$\frac{N_n}{N_m} = \exp[-(E_n - E_m)/kT].$$

При инверсной населенности уровней это отношение больше единицы. И т.к.  $E_n > E_m$ , то это формально означает, что  $T < 0$ . Такое состояние называют состоянием с отрицательной температурой.

Изменение интенсивности света с расстоянием  $l$  при прохождении через поглощающую среду с коэффициентом поглощения  $k$  описывается законом Бугера:

$$I = I_0 \exp(-kl).$$

При инверсной населенности энергетических уровней вынужденное излучение может превысить поглощение света, значит  $I > I_0$  и, как следствие,  $k < 0$ . Такая совокупность атомов с инверсной населенностью называется средой с отрицательным коэффициентом поглощения.

### 3.14. ЛАЗЕРЫ

Процесс перевода среды в инверсное состояние называют накачкой усиливающей среды. Наиболее естественной представляется накачка, при которой атомы переводятся с нижнего уровня  $E_1$  на верхний возбужденный уровень  $E_2$  облучением светом с частотой  $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ . Если усиливающая среда является газообразной, то это можно также осуществить при газовом разряде (электрическая накачка). Но это только на первый взгляд. На самом деле за счет спонтанного излучения атомов, находящихся на возбужденном уровне, а также за счет столкновения атомов с электронами, атомы «сваливаются» через время порядка  $10^{-8}$  с на нижний уровень и система не удерживается в инверсном состоянии. Таким образом, для получения инверсной населенности использование двухуровневой системы не подходит. Более эффективно использование трехуровневой системы с наличием метастабильного уровня.

Впервые на возможность создания сред, в которых свет будет усиливаться за счет индуцированного излучения, указал в 1939 г. советский физик В. Фабрикант. В 1953 г. Н.Г. Басовым, А.М. Прохоровым, Таунсом и Вебером были созданы первые молекулярные генераторы, работающие в области сантиметровых волн – мазеры (аббревиатура английской фразы Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation). В 1960 г. Мейманом был создан генератор, работающий в оптическом диапазоне – лазер (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Лазеры называют также оптическими квантовыми генераторами.

В лазере Меймана рабочим телом был цилиндр из розового рубина диаметром порядка 1 см и длиной около 5 см (рис. 3.11). Торцы рубинового стержня были тщательно отполированы и представляли строго параллельные друг другу и перпендикулярные оси стержня зеркала (один из торцов пропускал около 8 % света). Накачка лазера осуществлялась импульсной ксеноновой лампой достаточно большой мощности.

Рубин представляет собой окись алюминия ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), в которой некоторые из атомов алюминия замещены на атомы хрома. При поглощении света ( $\lambda = 560 \text{ нм}$ ) ионы  $\text{Cr}^{+++}$  (рис. 3.12) переходят в возбужденное состояние 3.

Обратный переход в основное состояние 1 осуществляется в два этапа. Вначале возбужденные ионы отдают часть своей энергии кристаллической решетке (без излучения) и переходят в метастабильное состояние 2, в котором находятся около  $10^{-3} \text{ с}$ , что в  $10^5$  раз превосходит время жизни в обычном возбужденном состоянии.

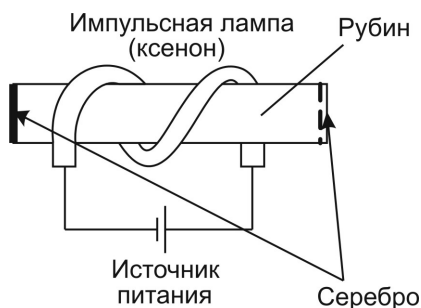


Рис. 3.11

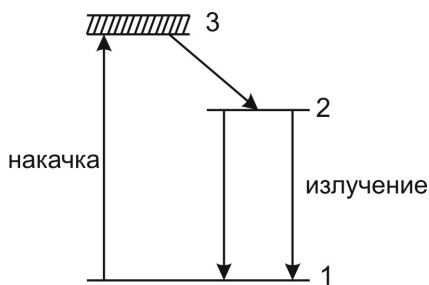


Рис. 3.12

Затем ион переходит в основное состояние, излучая фотон ( $\lambda = 694,3$  нм). Излученный при этом фотон может вызвать вынужденное испускание дополнительных фотонов, которые в свою очередь вызовут вынужденное излучение другого фотона и т.д. В результате образуется каскад фотонов. Фотоны, возникающие при вынужденном излучении, летят в том же направлении, что и падающие, и при многократном отражении от зеркал их путь в кристалле будет очень большим. При правильной юстировке зеркал рождаются мощные импульсы с частотой порядка нескольких импульсов в минуту.

В настоящее время разработано большое число лазеров, использующих как различные рабочие среды, так и различные принципы работы.

Излучение лазеров отличается рядом замечательных особенностей:

- 1) строгая монохроматичность,
- 2) высокая временная и пространственная когерентность,
- 3) большая интенсивность,
- 4) малая угловая ширина пучка.

В настоящее время лазеры нашли самое широкое применение в различных областях науки и техники. Перечисление займет слишком много места, поэтому рассмотрим только их возможные типы для целей противоракетной обороны (ПРО), основываясь на материалах зарубежной печати.

### 3.15. ЛАЗЕРЫ ДЛЯ СИСТЕМЫ ПРО

**Химические.** В них генерация излучения происходит в процессе химической реакции между двумя газами (H, F), (D, F). Работают в непрерывном режиме. Выходная мощность порядка  $10^6$  Вт. Для сравнения: пучок порядка  $10^4$  Вт способен за считанные секунды прожечь стальную пластину толщиной около 6 мм.

**Экимерные.** Под действием электрического разряда неустойчивое состояние из двух молекул (экимер) диссоциирует, испуская излучение (на этом основана работа фтор-криптоновых лазеров). Экимерный лазер генерирует излучение в виде коротких импульсов порядка 1 мкс с энергией около  $10^4$  Дж (Лос-Аламосская национальная лаборатория, США).

**Лазеры на свободных электронах.** Принцип их действия заключается в том, что пучок электронов направляют мимо ряда «раскачивающихся» магнитов, которые заставляют электроны колебаться и испускать излучение. Меняя расстояние между магнитами или энергию электронов, можно получать излучение теоретически любой длины волны. Это имеет принципиальное значение при распространении излучения в атмосфере, в которой есть так называемые «окна прозрачности». На длине волны 1 мкм пиковая мощность составляет порядка  $10^6$  Вт.

Самый экзотичный – **рентгеновский**. Состоит из ядерного заряда, окруженного цилиндрической системой тонких металлических волокон. Рентгеновское излучение, возникающее при ядерном взрыве, заставляет металлические волокна за короткое время испустить вторичный пучок рентгеновских лучей. При этом, естественно, устройство разрушается. Из-за сильного поглощения рентгеновских лучей атмосферой данное устройство следует располагать выше 80 км, возможно, по способу «выстреливания» в космос.

## **ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ**

### **«ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР. АТОМ ВОДОРОДА»**

3.1. Найти с помощью уравнения Шредингера энергию гармонического осциллятора с частотой  $\omega$  в стационарном состоянии, для которого волновая функция имеет вид:

а)  $\psi(x) = A \exp(-a^2 x^2)$ ,

б)  $\psi(x) = B x \exp(-a^2 x^2)$ , где  $A, B, a$  – некоторые константы.

3.2. Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с частотой  $\omega$  может быть приведено к виду  $\psi''_{\xi} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0$ , где  $\xi = \alpha x$ ,  $\alpha$  – постоянная,  $\lambda$  – параметр. Имея в виду, что собственные значения параметра  $\lambda$  равны  $2n + 1$ , где  $n = 0, 1, 2, \dots$ , найти собственные значения энергии осциллятора.

3.3. Три первые собственные функции гармонического осциллятора имеют вид:

$$\psi_0 = A_0 \exp(-\alpha^2 x^2 / 2), \quad \psi_1 = A_1 x \exp(-\alpha^2 x^2 / 2),$$

$$\psi_2 = A_2 (2\alpha^2 x^2 - 1) \exp(-\alpha^2 x^2 / 2),$$

где  $\alpha$  – постоянная. Вычислить нормировочные коэффициенты  $A_0, A_1, A_2$ .

3.4. Найти наиболее вероятное значение координаты  $x_{\text{вер}}$  квантового гармонического осциллятора в состоянии  $\psi_1(x) = A_1 x \exp(-\alpha^2 x^2 / 2)$  и нарисовать примерный график распределения плотности вероятности различных значений  $x$ .

3.5. Найти наиболее вероятное значение координаты  $x_{\text{вер}}$  квантового гармонического осциллятора в состоянии  $\psi_2(x) = A_2 (2\alpha^2 x^2 - 1) \exp(-\alpha^2 x^2 / 2)$  и нарисовать примерный график распределения плотности вероятности различных значений  $x$ .

3.6. Найти среднеквадратичное значение координаты  $x_{\text{ср. кв}}$  квантового гармонического осциллятора в состоянии  $\psi_0(x) = A_0 \exp(-\alpha^2 x^2 / 2)$  и среднее значения модуля  $x$  в состоянии  $\psi_1(x) = A_1 x \exp(-\alpha^2 x^2 / 2)$ .

3.7. Квантовый гармонический осциллятор находится в основном состоянии  $\psi_0(x) = A \exp(-\alpha^2 x^2 / 2)$  в одномерном потенциальном поле  $U(x) = kx^2 / 2$ . Найти:

а) координату  $x_0$ , соответствующую классической границе поля в этом состоянии;

б) вероятность пребывания частицы вне классических границ поля.

3.8. Зная собственные функции и собственные значения энергии квантового гармонического осциллятора, найти собственные значения энергии частицы массы  $m$ , находящейся в одномерном потенциальном поле,  $U(x) = kx^2 / 2$  при  $x > 0$  и  $U = \infty$  при  $x \leq 0$ .

3.9. Частица массы  $m$  движется в трехмерном пространстве в потенциальном поле  $U(x) = (k/2)(x^2 + y^2 + z^2)$ , где  $k$  – постоянная. Найти собственные значения энергии такой частицы и кратность вырождения  $n$ -го энергетического уровня. *Указание:* воспользоваться формулами для одномерного квантового осциллятора.

3.10. Электрон атома водорода находится в состоянии  $\psi(r) = A \exp(-r/r_0)$ , где  $A$ ,  $r_0$  – некоторые постоянные. Найти их значения и энергию электрона.

3.11. Определить энергию электрона в атоме водорода в состоянии  $\psi(r) = A(1 + ar) \exp(-\alpha r)$ , где  $A$ ,  $a$ ,  $\alpha$  – некоторые постоянные.

3.12. В основном состоянии атома водорода волновая функция электрона имеет вид  $\psi(r) = A \exp(-r/r_0)$ , где  $A$ ,  $r_0$  – некоторые постоянные ( $r_0$  – первый боровский радиус). Найти наиболее вероятное расстояние между электроном и ядром  $r_{\text{вер}}$  и вероятность нахождения электрона в области  $r < r_{\text{вер}}$ .

3.13. Определить для основного состояния электрона в атоме водорода средние значения  $\langle r \rangle$ ,  $\langle r^2 \rangle$  и  $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle$ .

3.14. Найти для электрона атома водорода в основном состоянии  $\psi(r) = A \exp(-r/r_0)$  отношение среднего расстояния от ядра  $\langle r \rangle$  к наиболее вероятному  $r_{\text{вер}}$ .

3.15. Найти для электрона атома водорода в основном состоянии  $\psi(r) = A \exp(-r/r_0)$  вероятность его нахождения вне классических границ поля.

3.16. В основном состоянии атома водорода волновая функция электрона имеет вид  $\psi(r) = A \exp(-r/r_0)$ , где  $A$ ,  $r_0$  – некоторые постоянные ( $r_0$  – первый боровский радиус). Найти для этого состояния среднее значение модуля кулоновской силы и потенциальной энергии взаимодействия электрона с ядром.

3.17. Электрон атома водорода находится в состоянии с волновой функцией, радиальная часть которой имеет вид  $R(r) \sim r \exp(-r/2r_0)$ , где  $r_0$  – первый боровский радиус. Найти в этом состоянии наиболее вероятное расстояние между электроном и ядром  $r_{\text{вер}}$  и среднее расстояние электрона от ядра  $\langle r \rangle$ .

3.18. Найти средний электростатический потенциал, создаваемый электроном в центре атома водорода, если электрон находится в основном состоянии  $\psi(r) = A \exp(-r/r_0)$ , где  $A$ ,  $r_0$  – некоторые постоянные ( $r_0$  – первый боровский радиус).

3.19. Проверить непосредственным интегрированием ортогональность собственных функций гармонического осциллятора.



## 4. КВАНТОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

### 4.1. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

#### СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛЕ

Рассмотрим поведение так называемых «свободных» электронов в металле без учета влияния кристаллической решетки металла. Может возникнуть вопрос: как это – «без учета влияния кристаллической решетки»? И этот вопрос будет совершенно правомерен. Опираясь на наши «обычные» представления, легко сделать вывод о том, что обладающий небольшой энергией электрон должен с огромным трудом протискиваться через кристалл. Расстояние между атомами – порядка нескольких ангстрем (ангстрем равен  $10^{-10}$  м). Эффективный диаметр атомов при рассеянии на них электронов – порядка одного ангстрема. Поэтому следует ожидать, что средний свободный пробег электрона между столкновениями будет порядка нескольких ангстрем (это почти ноль!), и электрон почти тотчас же должен влететь в какой-нибудь атом.

И тем не менее, природа устроена так, что, когда решетка кристалла идеальна, электрону ничего не стоит пройти через кристалл совершенно свободно, почти как в вакууме. Почему это так, мы поймем позже, это чисто квантовый эффект. И только наличие неидеальностей в решетке (примеси, отсутствие какого-либо атома, колебания решетки и т.д.) приводит к тому, что металлы обладают сопротивлением. Но об этом позже. А пока рассмотрим квантовое поведение свободных электронов в металле.

Возьмем кубик металла со стороной  $L$ . Его объем  $V = L^3$ . Запустим вначале в кубик только один электрон. Так как мы используем приближение свободных электронов, то потенциальную энергию можно взять равной нулю ( $U = 0$ ).

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера:

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

В декартовой системе координат при  $U = 0$  оно примет вид:

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right) + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0.$$

Введем обозначение  $2m/\hbar^2 = k^2$ . Параметр  $k$  имеет смысл волнового вектора, связанного с импульсом соотношением  $\hbar \vec{k} = \vec{p}$ . Тогда решение уравнения Шредингера можно записать в виде:

$$\Psi = C \exp\left[i(k_x x + k_y y + k_z z)\right],$$

где  $i$  – мнимая единица,  $C$  – некоторая константа, определяемая из условий нормировки.

Так как мы не рассматриваем поведение электрона вне кубика, то потребуем выполнения для волновой функции условий периодичности (формально это означает, что мы рассматриваем бесконечное множество составленных вплотную друг к другу кубиков):

$$\Psi(x) = \Psi(x + L), \quad \Psi(y) = \Psi(y + L), \quad \Psi(z) = \Psi(z + L).$$

Эти условия будут выполнены только в том случае, если волновое число  $k$  принимает следующие значения:

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_1, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_2, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_3,$$

где  $n_1, n_2, n_3$  – целые числа  $0, 1, 2, 3, \dots$ , не равные нулю одновременно.

Чтобы это проверить, воспользуемся формулой Эйлера и условиями периодичности:

$$\exp(ik_x x) = \exp[ik_x (x + L)] \Rightarrow \exp(ik_x L) = 1 \Rightarrow k_x L = 2\pi n.$$

Таким образом, мы доказали, что значения волнового вектора и, соответственно, энергии квантуются. И для энергии получаем выражение:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) = E_k.$$

Состояние электрона в металле (и вообще в любом кристаллическом теле) будем определять значением волнового вектора  $\vec{k}$  и спином. Так как значение волнового вектора определяется набором  $\{n_1, n_2, n_3\}$ , то, задавая набор  $\{n_1, n_2, n_3\}$ , мы тем самым определяем состояние электрона.

Как видно из проведенного анализа, уровни энергии в данном случае являются вырожденными (напомним: имеется несколько различных состояний, соответствующих одному значению энергии).

Для наглядного обозначения состояний электрона введем воображаемое пространство, по осям которого будем откладывать значения чисел  $\{n_1, n_2, n_3\}$  (рис. 4.1). Тогда, если забыть про спин, каждое состояние отобразится точкой в этом пространстве.

Плотность размещения точек в этом пространстве равна единице (т.к. в каждом единичном кубике находится только одна точка и  $\Delta n = 1$ ). Поверхность равных значений энергии – сфера с радиусом  $n_0 = \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$  (рис. 4.2).

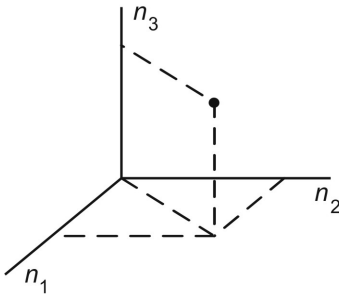


Рис. 4.1

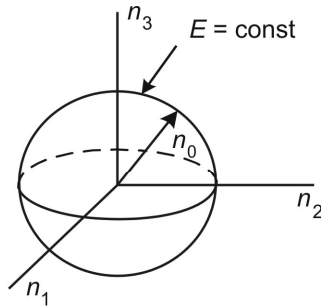


Рис. 4.2

Найдем число разрешенных состояний, располагающихся внутри этой сферы (число состояний, энергия которых не превышает  $E$ ). Обозначим его  $\nu_E$ .

Так как плотность размещения точек равна единице, то это число равно просто объему этой сферы, умноженному на два (в каждом состоянии могут находиться по два электрона, обладающих спинами разного направления):

$$\nu_E = 2 \frac{4}{3} \pi n_0^3 = \frac{8}{3} \pi (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^{3/2} = \frac{8}{3} \pi \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 E^{3/2}.$$

Учитывая, что  $L^3$  равно объему кубика  $V$ , получаем окончательно:

$$\nu_E = \frac{8}{3} \pi \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} E^{3/2} V.$$

Запустим теперь в кубик много электронов (порядка числа атомов). В силу принципа запрета Паули, электроны разбегутся по разным состояниям. Эти состояния окажутся затем либо заняты электронами, либо свободными. Т.е. каждому электрону в этом пространстве квантовых чисел отводится своя маленькая «комнатка», которую он может и не занимать.

Посмотрим, что будет при абсолютном нуле температуры. Вследствие принципа Паули все электроны будут занимать каждый свое место на самых нижних уровнях энергии (т.е. заполнят все нижние «комнатки»). Поэтому все состояния с энергией, меньшей некоторого значения, будут заполнены электронами, а состояния с энергией, большей этого значения, будут свободны. Это значение энергии обозначается  $E_F(0)$  и называется уровнем Ферми при абсолютном нуле температуры. Иначе можно сказать, что  $E_F(0)$  – это максимальное значение энергии электронов при абсолютном нуле температуры. Его значение можно найти из условия, что число заполненных состояний при нулевой температуре должно быть равно числу всех электронов в металле:

$$nV = \nu_E = \frac{8}{3} \pi \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} E_F(0)^{3/2} V.$$

Отсюда получаем:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3};$$

здесь  $n$  – концентрация электронов в металле.

Оценим значение  $E_F(0)$ . Возьмем для концентрации электронов среднее значение  $5 \cdot 10^{22} \text{ 1/см}^3$ . Тогда  $E_F(0)$  будет около 5 эВ. Много это или мало? Чтобы сообщить классическому электронному газу такую энергию, его необходимо нагреть до температуры порядка  $10^4 \text{ К}$  (с учетом пропорциональности энергии и температуры). Средняя тепловая энергия при комнатной температуре составляет значение около  $1/40 \text{ эВ}$ . Такая энергия может возбудить только электроны, находящиеся на самых верхних уровнях вблизи уровня Ферми. А их очень мало. Основная масса электронов, находящихся на более глубоких уровнях, не способна поглощать энергию и изменять свое состояние. К чему это приводит, поймем позднее.

## 4.2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФЕРМИ-ДИРАКА. ФЕРМИОНЫ

При абсолютном нуле температуры в каждом состоянии с энергией  $E \leq E_F(0)$  находится один электрон, в состояниях с  $E > E_F(0)$  электронов нет. Для характеристики вероятности заполнения электронами различных состояний при  $T \neq 0$  введем функцию распределения электронов по состояниям:

$$f(E) = \frac{dN}{d\nu},$$

где  $dN$  – число электронов, находящихся в интервале состояний от  $\nu$  до  $\nu + d\nu$ ,  $d\nu$  – число состояний с энергией, заключенной в интервале от  $E$  до  $E + dE$ . Число состояний  $d\nu$  можно представить в виде:  $d\nu = g(E)dE$ , где  $g(E)$  называется плотностью состояний и равно числу состояний, приходящихся на единичный интервал энергии. Для плотности состояний  $g(E)$  должно выполняться очевидное условие:

$$\int_0^{\infty} f(E)g(E)dE = nV,$$

которое является, по существу, условием нормировки функции  $f(E)$ .

В силу определения  $f(E)$ , функция распределения представляет вероятность того, что состояние с энергией  $E$  занято электроном.

При абсолютном нуле температуры эта функция имеет вид:  $f(E) = 1$  при  $E \leq E_F(0)$  и  $f(E) = 0$  при  $E > E_F(0)$  (рис. 4.3).

При повышении температуры  $f(E)$  деформируется: электроны вблизи  $E_F(0)$  начинают занимать более высокие уровни энергии, внутренние же электроны не могут изменять состояние (рис. 4.4).

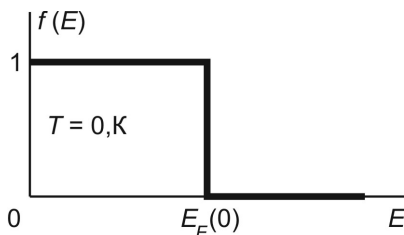


Рис. 4.3

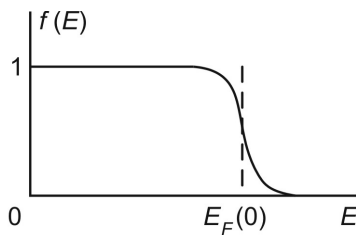


Рис. 4.4

Вид функции распределения при ненулевой температуре играет большую роль в квантовой теории электронов, однако определение вида функции распределения достаточно сложно, поэтому просто приведем результат:

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/kT] + 1},$$

где  $f(E)$  – функция распределения Ферми-Дирака,  $\mu$  – химический потенциал. Его часто обозначают как  $E_F(T)$  и называют просто уровнем Ферми. При  $T = 0$   $E_F \rightarrow E_F(0)$ . В связи с новым обозначением распределение Ферми-Дирака часто записывают в виде:

$$f(E) = \frac{1}{\exp[(E - E_F)/kT] + 1}.$$

Легко проверить, что при нулевой температуре распределение Ферми-Дирака имеет вид ступенчатой функции.

Частицы, подчиняющиеся распределению Ферми-Дирака, называются фермионы. Фермионами являются электроны, нейтрино, нуклоны и т.д. Это частицы с полуцелым спином. Для фермионов характерно то, что они никогда не занимают состояние, в котором уже кто-то есть. Иначе говоря, фермионы не накапливаются в одном состоянии.

Функции распределения Ферми-Дирака можно придать еще один смысл: это – среднее число электронов, находящихся в состоянии с энергией  $E$ .

С ростом температуры, как уже отмечалось, происходит размытие края кривой функции распределения, но в любом случае при  $E = E_F$   $f(E) = 1/2$ . Т.е. можно сказать, что уровень Ферми – это уровень энергии, вероятность заполнения которого равна 1/2.

При больших значениях энергии, когда  $E - E_F \gg kT$ , экспонента в распределении Ферми-Дирака много больше единицы, тогда распределение Ферми-Дирака переходит в классическое распределение Больцмана:

$$f(E) \approx \exp[-(E - E_F)/kT] = \text{const} \exp(-E/kT).$$

Поведение электронного газа существенно зависит от соотношения между температурой тела и температурой Ферми, равной  $E_F/k$ . Различают два предельных случая:

1)  $kT \ll E_F$ ; в этом случае газ электронов называется вырожденным;

2)  $kT \gg E_F$ ; такой газ называется невырожденным.

В металлах температура Ферми составляет величину порядка  $10^4$  К. Поэтому даже при температурах, близких к плавлению, электронный газ является вырожденным. В полупроводниках плотность свободных электронов гораздо ниже, чем в металлах, соответственно – ниже значение температуры Ферми. Поэтому уже при комнатных температурах электронный газ во многих полупроводниках является невырожденным и подчиняется распределению Больцмана.

При низких температурах зависимость  $E_F(T)$  имеет вид:

$$E_F(T) \approx E_F(0)(1 - \alpha T^2).$$

Параметр  $\alpha$  имеет очень малое значение, поэтому часто полагают  $E_F \approx E_F(0)$ , т.е. уровень Ферми практически не зависит от температуры. Но иногда эта зависимость имеет принципиальное значение, например, в случае анализа явлений, происходящих при контакте различных металлов или полупроводников.

Для многих практических задач о поведении свободных электронов в металлах и полупроводниках необходимо знание распределения электронов не по состояниям, а по энергии. Для этого найдем концентрацию электронов  $dn(E)$  в интервале энергии от  $E$  до  $E+dE$ :

$$dn(E) = \frac{dN}{V} = \frac{f(E)d\nu}{V}.$$

Вспомним, что число состояний с энергией, не превышающей  $E$ , равно:

$$\nu_E = \frac{8}{3} \pi \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} E^{3/2} V.$$

Найдем его дифференциал и подставим в выражение для  $dn(E)$ :

$$dn(E) = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} f(E) dE.$$

С учетом распределения Ферми-Дирака получаем окончательно:

$$dn(E) = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{E} dE}{\exp[(E - E_F)/kT] + 1}. \quad (4.1)$$

При этом мы попутно получили и выражение для плотности состояний  $g(E)$ :

$$g(E) = \frac{d\nu}{dE} = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} V. \quad (4.2)$$

### 4.3. ФОНОНЫ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНА

По кристаллической решетке (и не только металлов) могут двигаться не только электроны. Согласно классическим представлениям, кристалл, состоящий из  $N$  атомов, является системой с  $3N$  колебательными степенями свободы, на каждую из которых приходится в среднем энергия  $kT$ . Квантовая механика дает другой результат для средней энергии.

Рассмотрим вначале колебания одного независимого гармонического осциллятора.

Ранее было показано, что его энергия принимает значения:

$$\varepsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

Найдем его среднюю энергию. Полагая, что распределение совокупности независимых осцилляторов по состояниям с разной энергией подчиняется распределению Больцмана, для  $\langle \varepsilon \rangle$  получаем выражение:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega \exp(-n\hbar\omega/kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\hbar\omega/kT)} + \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (4.3)$$

Подобное выражение появляется при выводе формулы Планка для спектральной плотности теплового излучения абсолютно черного тела. В данном случае отличие только во втором слагаемом, определяющем энергию «нулевых» колебаний. Для расчета первого сла-



гаемого в выражении (4.3) введем переменную  $\alpha = 1/kT$ . Тогда его можно привести к более простому виду следующим образом:

$$\frac{\sum n\hbar\omega \exp(-\alpha n\hbar\omega)}{\sum \exp(-\alpha n\hbar\omega)} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \left[ \ln \sum \exp(-\alpha n\hbar\omega) \right] = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \frac{1}{1 - \exp(-\alpha\hbar\omega)}.$$

Выполнив дифференцирование по  $\alpha$ , получаем выражение для средней энергии осциллятора:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

При достаточно больших температурах второе слагаемое стремится к  $kT$  (именно это и дает классическая теория).

«Включим» теперь взаимодействие между атомами. Тогда колебания атомов уже не будут являться независимыми. Для учета взаимодействия между атомами вспомним так называемые «собственные колебания» струны из раздела механики. Там было показано, что произвольные колебания струны являются суперпозицией гармонических стоячих волн. Так и здесь: каждому колебанию кристаллической решетки соответствует стоячая волна, устанавливающаяся в объеме кристаллического тела. Частоты этих колебаний ( $\omega_i$ ) имеют дискретный спектр. Таким образом, энергия колебаний кристаллической решетки  $U$  может быть представлена как сумма энергий отдельных колебаний:

$$U = \sum_{i=1}^{3N} \hbar\omega_i \sum_{n_i=0}^{\infty} (n_i + 1/2).$$

Здесь  $n_i$  – главное квантовое число, нумерующее состояние с частотой  $\omega_i$ ,  $N$  – число колеблющихся атомов. За вычетом энергии нулевых колебаний энергия каждого колебания частоты  $\omega_i$  складывается из порций величины

$$\varepsilon_i = \hbar\omega_i.$$

Эта порция энергии (квант) принадлежит частице, называемой **фононом** (не путать с фотоном, хотя это очень близкие понятия). Кроме энергии фононы обладают также импульсом

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

здесь  $k$  волновое число соответствующего колебания.

Фонон во многих отношениях ведет себя так, как если бы он был частицей с энергией  $\hbar\omega$  и импульсом  $\hbar\vec{k}$ . Однако, в отличие от обычных частиц (электронов, фотонов...), фонон не может возникнуть в вакууме. Фонон – это колебание атомов, и для его возникновения и существования нужна некоторая среда. Поэтому он называется «квазичастица».

Найдем среднее число фононов частоты  $\omega_i$ . Для этого усредним энергию фононов:

$$\langle (n_i + 1/2)\hbar\omega_i \rangle = \langle n_i \hbar\omega_i \rangle + \hbar\omega_i / 2.$$

Подобное мы только что проделывали, поэтому просто приведем результат:

$$\langle n_i \hbar\omega_i \rangle = \frac{\hbar\omega_i}{\exp(\hbar\omega_i / kT) - 1} = \langle n_i \rangle \hbar\omega_i.$$

Отсюда находим:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_i / kT) - 1}.$$

Данное соотношение и представляет собой распределение фононов по энергии. Кванты электромагнитного поля (фотоны) также подчиняются подобному распределению. Из этой формулы следует, что в кристалле может одновременно возбуждаться неограниченное количество одинаковых фононов. Значит, на фононы, как и фотоны, принцип Паули не распространяется. Поведение фононов и фотонов определяется одной и той же статистикой. Но есть и существенное различие: фотоны – истинные частицы, фононы – квазичастицы. Полученное распределение представляет собой частный случай распределения Бозе-Эйнштейна, которому подчиняются частицы, обладающие целочисленным спином:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp((E_i - \mu) / kT) - 1},$$

где  $\langle n_i \rangle$  – среднее число частиц, находящихся в состоянии с энергией  $E_i$ ,  $\mu$  – химический потенциал ( $\mu < 0$ ), определяемый из условия

$$\sum \langle n_i \rangle = N.$$

Здесь  $N$  – полное число частиц в системе. Для фотонов и фононов  $\mu = 0$ . Частицы, подчиняющиеся этой статистике, – называ-

ются бозонами. Для них характерно то, что вероятность рождения в состоянии, в котором уже имеется  $n$  частиц, пропорциональна числу частиц. Т.е. бозоны, в отличие от фермионов, являются «коллективистами».

#### **4.4. ПРИНЦИП НЕРАЗЛИЧИМОСТИ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ**

В отличие от макроскопических тел, элементарные частицы (электроны, протоны, нейтроны и др.) обладают совершенно одинаковыми свойствами. В связи с этим возникает вопрос: как отличить одну частицу от другой такой же частицы? Рассмотрим, например, систему, состоящую из двух электронов. Классическая физика исходит из того, что каждый электрон движется по своей определенной траектории, и потому принципиально возможно проследить за движением каждого из них. И если эти электроны поменяются местами, то мы получаем новое состояние, которое во всех отношениях обладает теми же свойствами, что и исходное состояние, но отличается нумерацией электронов; т.е. в классической физике одинаковые частицы всегда различимы.

Совсем иначе дело обстоит в квантовой механике. Состояние системы из двух электронов описывается двухчастичной волновой функцией, являющейся функцией времени и координат обоих электронов. Обнаружив в какое-то время в данной точке пространства один из электронов, абсолютно невозможно сказать, какой из электронов оказался в данном месте: в квантовой механике нет понятия траектории, по которой можно было бы проследить движение электрона. А это означает, что если две одинаковые частицы поменяют местами, то результат такого обмена нельзя обнаружить экспериментально. Поэтому в квантовой механике принимается, что при перестановке двух одинаковых частиц не возникает нового состояния. Одинаковые частицы принципиально неразличимы! Можно говорить о состоянии системы одинаковых частиц только в целом, а не о состоянии каждой частицы в отдельности. Это положение формулируется в виде принципа тождественности одинаковых частиц: в системе одинаковых частиц реализуются только такие состояния, которые не меняются при перестановке местами двух любых частиц.

Вернемся к системе из двух одинаковых частиц. Волновую функцию такой системы, если отвлечься от времени, можно записать в виде  $\psi(q_1, q_2)$ . В случае бесспиновых частиц под  $q$  понимается совокупность трех пространственных координат каждой частицы. Если же частицы обладают и спином, то к тройке пространственных координат следует добавить еще спиновые координаты, которые могут принимать ряд дискретных значений, например, значение проекции спина. Переставим теперь местами эти частицы. Тогда волновая функция такого состояния будет иметь вид  $\psi(q_2, q_1)$ . Эту операцию можно рассматривать как результат действия на функцию  $\psi(q_1, q_2)$  линейного оператора  $\hat{P}$ , называемого оператором перестановки:

$$\psi(q_2, q_1) = \hat{P}\psi(q_1, q_2).$$

После вторичной перестановки получаем исходную функцию  $\psi(q_1, q_2)$ :

$$\psi(q_1, q_2) = \hat{P}\psi(q_2, q_1) = \hat{P}^2\psi(q_1, q_2).$$

Отсюда находим, что  $\hat{P}^2 = \pm 1$ . А это означает, что допустимы волновые функции двух типов:

$$\begin{aligned}\psi_s(q_1, q_2) &= \psi_s(q_2, q_1), \\ \psi_a(q_1, q_2) &= -\psi_a(q_2, q_1).\end{aligned}$$

В первом случае волновая функция при перестановке частиц не изменяется и называется симметричной, во втором случае функция называется антисимметричной и при перестановке одинаковых частиц изменяет знак.

Полученные результаты распространяются и на системы, состоящие из произвольного числа одинаковых частиц. В этом случае, как показывает опыт, симметрия или антисимметрия волновой функции имеет место при перестановке двух любых одинаковых частиц.

Частицы, описываемые симметричными волновыми функциями, называются бозе-частицами, или бозонами, и подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна. К бозонам относятся все частицы с нулевым или целым спином (наиболее яркие представители – фотоны). Частицы, описываемые антисимметричными волновыми функциями, называются ферми-частицами, или фермионами,

и подчиняются статистике Ферми – Дирака. К фермионам относятся все элементарные частицы с полуцелым спином (электроны, протоны, нейтроны, нейтрино и др.). Указанная связь между спином и статистикой справедлива и для сложных частиц, построенных из элементарных, т.е. для атомных ядер, атомов и молекул. Принадлежность сложной частицы к бозонам или фермионам определяется ее спином.

Например, атом водорода состоит из двух ферми-частиц: протона и электрона, спин каждого из которых равен  $1/2$ . Суммарный спин атома водорода в нормальном состоянии может быть равен либо 0 (спины электрона и протона антипараллельны), либо 1 (спины параллельны). В обоих случаях атом водорода в нормальном состоянии будет бозоном.

Второй пример. Ядро атома гелия  ${}^4\text{He}$  состоит из двух протонов и двух нейтронов. Спин этого ядра равен нулю, т.е. оно является бозоном. Бозоном будет и сам атом  ${}^4\text{He}$  в нормальном состоянии. А от ядро  ${}^3\text{He}$  состоит уже из нечетного числа частиц со спином  $1/2$  – двух протонов и нейтрона. Спин этого ядра нечетный, и поэтому оно является фермионом. Ядра и атомы  ${}^4\text{He}$  подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна, а ядра и атомы  ${}^3\text{He}$  – статистике Ферми – Дирака (это проявляется, например, в том, что  ${}^4\text{He}$  вблизи абсолютного нуля температуры обладает сверхтекучестью, а  ${}^3\text{He}$  – не обладает).

Применим принципы симметрии и антисимметрии к системе двух одинаковых не взаимодействующих между собой частиц. Уравнение Шредингера для такой системы в стационарном состоянии можно записать в виде:

$$\hat{H}\psi = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi = E\psi ,$$

где операторы Гамильтона  $\hat{H}_1$  и  $\hat{H}_2$  имеют совершенно одинаковый вид, но зависят от координат разных частиц. Решение данного уравнения (оно является уравнением с разделяющимися переменными) можно представить в виде произведения двух функций:  $\psi = \varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2)$ , где  $\varphi_\alpha$  и  $\varphi_\beta$  являются волновыми функциями, описывающими состояние каждой отдельной частицы, а символами 1 и 2 условно обозначены координаты первой и второй частицы. В силу тождественности частиц функция  $\varphi_\beta(1)\varphi_\alpha(2)$  также будет решением уравнения Шредингера. Однако

ни одна из этих функций не удовлетворяет принципу симметрии или антисимметрии. Но из них можно составить линейные комбинации, среди которых будет симметричная функция:

$$\psi_s = \varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2) + \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1) \quad (4.4)$$

и антисимметричная

$$\psi_a = \varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2) - \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1). \quad (4.5)$$

Состояние, описываемое функцией  $\psi_s$ , может реализоваться в случае системы двух одинаковых бозонов, а состояние  $\psi_a$  – в случае системы двух одинаковых фермионов.

В случае не взаимодействующих одинаковых частиц имеет смысл говорить о состоянии не только системы в целом, но и о состоянии одной частицы. Например, можно сказать, что одна какая-то частица находится в состоянии  $\varphi_\alpha$ , а другая – в состоянии  $\varphi_\beta$ . При этом фермионы ведут себя совершенно иначе, чем бозоны.

В системе одинаковых фермионов не может быть двух частиц, находящихся в одном и том же состоянии. Это отчетливо видно из соотношения (4.5), так как в случае  $\varphi_\alpha = \varphi_\beta$  волновая функция системы обращается в нуль, что физически не соответствует никакому состоянию. Это положение называется принципом запрета Паули, которым мы уже пользовались ранее.

Что касается бозонов, то на их состояние принцип симметрии волновых функций не накладывает никаких ограничений, подобных принципу запрета Паули. В одном и том же состоянии может находиться любое число одинаковых бозонов.

## **ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ**

### **«КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛЕ»**

4.1. Найти с помощью формулы (4.1) среднюю кинетическую энергию свободных электронов в металле при температуре 0 К, если их максимальная кинетическая энергия равна  $E_{\max}$ .

4.2. Опираясь на распределение электронов в металле по энергиям, найти распределение  $dn(p)$  электронов по импульсам. Найти частный случай распределения при температуре 0 К.

4.3. Найти долю  $\eta$  свободных электронов в металле при температуре 0 К, кинетическая энергия которых больше половины максимальной.

4.4. Вычислить температуру идеального газа, у которого средняя кинетическая энергия частиц равна средней кинетической энергии свободных электронов в меди при температуре 0 К. Принять, что на каждый атом приходится один свободный электрон.

4.5. Найти интервал между соседними уровнями свободных электронов в металле при температуре 0 К вблизи уровня Ферми, если объем металла  $V = 1,00 \text{ см}^3$  и концентрация свободных электронов  $n = 2,0 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

4.6. Вычислить наиболее вероятную  $\vartheta_{\text{вер}}$  и среднюю  $\langle \vartheta \rangle$  скорости свободных электронов в меди при температуре 0 К, если их концентрация равна  $8,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

4.7. Получить функцию распределения свободных электронов в металле по дебройлевским длинам волн при температуре 0 К.

4.8. Найти давление электронного газа в металле при температуре 0 К при концентрации свободных электронов  $2,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ . Показать, что оно составляет  $2/3$  от объемной плотности его кинетической энергии (точно так же, как и для классического идеального газа).

4.9. Получить выражение для концентрации свободных электронов в металле, для которых скорости находятся в интервале от  $\vartheta$  до  $\vartheta + d\vartheta$ :

$$n(\vec{\vartheta})d^3\vartheta = 2(m/2\pi\hbar)^3 (1 + \exp[(E - E_F)/kT])^{-1} d^3\vartheta,$$

где  $d^3\vartheta = d\vartheta_x d\vartheta_y d\vartheta_z$ .

*Указание.* Учесть выражение для концентрации свободных электронов в металле.

4.10. Свойства щелочных металлов хорошо описываются моделью свободных электронов. Найти для цезия значение уровня Ферми, считая, что на каждый атом приходится один свободный электрон.

## 5. ЗОННАЯ ТЕОРИЯ ПРОВОДИМОСТИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

### 5.1. ТИПЫ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ

Большинство элементов и соединений обнаруживают кристаллическую упорядоченную структуру. Механизм, связывающий атомы в молекулы, может приводить к образованию безграничных твердых периодических структур, которые можно рассматривать как сверхмолекулы. В зависимости от природы частиц, находящихся в узлах кристаллической решетки, и от характера сил взаимодействия между частицами, различают четыре основных типа кристаллической связи.

**Ионные кристаллы.** Подобно ионным и ковалентным молекулам, существуют ионные и ковалентные кристаллы. Типичным примером ионной решетки является структура ионного кристалла NaCl, имеющего кубическую решетку. Ближайшими соседями у каждого иона  $\text{Na}^+$  являются шесть ионов  $\text{Cl}^-$ . Этому пространственному расположению ионов  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$  соответствует наименьшая энергия (т.е. при образовании такой конфигурации выделяется максимальная энергия). Этим и объясняется то, что при охлаждении до температуры ниже точки плавления NaCl и многие другие вещества стремятся образовать чистые кристаллы. В газообразном состоянии NaCl состоит из молекул, в которых объединены попарно ионы натрия и хлора. Образующая молекулу группировка из  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$  утрачивает в кристалле обособленное существование. Весь кристалл в целом можно рассматривать как одну гигантскую молекулу.

**Ковалентные кристаллы.** За счет данной связи (ее называют гомеополярной, или ковалентной) образуются так называемые атомные кристаллы. Ранее мы рассматривали механизм образования молекулы метана  $\text{CH}_4$ , в которой ковалентная связь осуществляется электронными парами валентных, т.е. наименее связанных с атомами, электронов. Молекула метана представляет



собой правильный тетраэдр, в вершинах которого располагаются атомы водорода, а в центре находится атом углерода. Поскольку каждый электрон способен обеспечить связь только с одним атомом, то число связей, в которых может участвовать данный атом (число соседей, с которыми он может быть связан), равно его валентности.

Разновидностью твердого углерода, обладающего наиболее сильной связью, является алмаз. Если четыре атома водорода в  $\text{CH}_4$  заменить атомами углерода, то получится элементарная ячейка кристаллической структура алмаза. Структуры, аналогичные алмазу, образуют при кристаллизации и другие четырехвалентные элементы: германий, кремний, олово и др. Для их решеток характерно то, что каждый атом окружен четырьмя равноотстоящими от него соседями, расположенными в вершинах правильного тетраэдра. Каждый из четырех валентных электронов входит в электронную пару, связывающую данный атом с одним из соседей.

**Металлические кристаллы.** Допустим, что один из валентных электронов атома перешел на более высокий энергетический уровень. Можно ожидать, что его волновая функция станет более размытой. Но при этом электрон окажется ближе к соседним атомам. Поскольку остовы этих атомов обладают положительным зарядом и притягивают электрон, то они будут еще больше размывать электронную волновую функцию, что приведет к ее перекрытию с соседней. В результате волновая функция окажется равномерно размытой по всему кристаллу, с некоторыми сгущениями вблизи каждого притягивающего атомного остова (иона). Размытие волновой функции играет роль «цемента», скрепляющего положительные ионы, в противном случае решетка распалась бы под действием кулоновского отталкивания между ионами. Это и обуславливает их металлическую связь, характерную для кристаллов, построенных из одновалентных атомов (литий, натрий, калий и др.). Кристаллы с таким типом связи называются металлами. К металлам относятся элементы, атомы которых содержат внешние недостроенные электронные оболочки.

Металлическая связь возникает, когда атомы сближаются на расстояние, меньшее размеров облака внешних электронов.

Вследствие принципа запрета Паули такая конфигурация приводит к возрастанию энергии внешних электронов. Однако в случае металлов эта энергия все же меньше, чем в случае, когда атомы находятся на больших расстояниях друг от друга. Если атомы сближаются настолько, что их внутренние заполненные оболочки начинают соприкасаться, то ядра попадают в пределы области, занимаемой облаком внешних электронов соседнего атома. В таком случае внешний электрон притягивается соседними ядрами, что приводит к возрастанию его энергии связи и к еще большему увеличению размеров соответствующего облака. Это позволяет электрону приближаться к удаленным соседям, которые, в свою очередь, еще больше размывают электронное облако. В итоге волновая функция каждого из внешних электронов равномерно распределяется по всему кристаллу!

Нетрудно увидеть, что квантовая механика вполне разумно объясняет проводимость металлов. То, что в металлах приходится, по крайней мере, один свободный электрон на каждый атом, обусловлено отчасти волновой природой электронов. Эти свободные электроны (их еще называют электронами проводимости) не связаны с каким-либо определенным атомом и могут свободно перемещаться по металлу в любом направлении. Наличие свободных электронов в чистых металлах по существу следует рассматривать как макроскопическое проявление квантовых законов.

В ионных и ковалентных кристаллах внешние электроны связаны (локализованы вблизи ядра), поэтому такие кристаллы обычно не проводят электрический ток, — это изоляторы.

**Молекулярные кристаллы** представляют собой слабо связанные агрегаты молекул. Связь обусловлена силами Ван-дер-Ваальса. К молекулярным кристаллам относятся почти все органические кристаллы и многие другие соединения. Молекулярная связь является единственной связью у кристаллов, образованных из атомов инертных газов. Молекулярные решетки образуют, например,  $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ . Обычный лед, а также твердая углекислота представляют собой молекулярные кристаллы. Для молекулярных кристаллов характерны низкие температуры плавления, кипения и сублимации, а также сильная сжимаемость.

## 5.2. ТЕОРЕМА БЛОХА И ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА

Основной особенностью кристаллов, отличающей их от жидких и аморфных тел, является периодичность пространственного расположения атомов, молекул или ионов, из которых состоит кристалл. В этом проявляется так называемый дальний порядок. Периодичность расположения атомов проявляется в трансляционной симметрии. Это означает, что существуют три некопланарных вектора:  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  – такие, что при смещении (трансляции) решетки на вектор трансляции

$$\vec{l} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

она переходит сама в себя ( $n_1, n_2, n_3$  – целые числа, в том числе и нули). Если при неизменных направлениях  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  выбрать их длины минимальными, и при этом можно было бы трансляциями вдоль этих направлений получить всю кристаллическую решетку, то вектора  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  называются основными (базисными) векторами, а их совокупность – базисом решетки. Параллелепипед с ребрами  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  вместе с находящимися в нем атомами образует так называемую элементарную ячейку кристаллической решетки. Тогда длины ребер  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  являются основными периодами решетки.

Расположение атомов во всем кристалле можно определить, задав состав одной элементарной ячейки, путем бесконечного повторения таких ячеек. Однако фактическое определение элементарной ячейки является до некоторой степени произвольным.

Трансляционная симметрия кристаллических тел, очевидно, значительно влияет на различные возбуждения, которые нарушают точную симметрию рассматриваемых структур. Существует несколько типов таких возбуждений; из них наиболее важными являются колебания решетки, а также электронные состояния, соответствующие движению электронов в поле покоящейся решетки. Во всех этих случаях следует рассматривать уравнение, инвариантное относительно трансляций решетки. Например, для электронных состояний волновая функция  $\psi(\vec{r})$  должна удовлетворять уравнению Шредингера, которое должно оставаться неизменным

при замене  $\vec{r}$  на  $\vec{r} + \vec{l}$  во всех операторах, действующих на функцию  $\psi(\vec{r})$  ( $\vec{l}$  – вектор трансляции).

В математическом плане следствием трансляционной симметрии является теорема Блоха, которая гласит, что волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера, при движении электрона в поле с периодическим потенциалом должна удовлетворять условию:

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{l}) = \exp(i\vec{k}\vec{l})\psi_k(\vec{r}), \quad (5.1)$$

где  $\vec{k}$  – волновой вектор. Условию (5.1) удовлетворяет и обычная волновая функция свободного электрона

$$\psi_k(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r}).$$

Этого и следовало ожидать, т.к. и в данном случае рассматривается решение уравнения Шредингера с периодическим потенциалом, только сам потенциал всюду равен нулю.

Иногда бывает удобно представить волновую функцию электрона с данным значением  $\vec{k}$  в виде, возможно более близком к волновой функции свободного электрона. Для этого представим  $\psi(\vec{r})$  в виде

$$\psi_k(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r})u_k(\vec{r}), \quad (5.2)$$

полагая, что функция  $u_k(\vec{r})$  является почти постоянной. Из сравнения формул (5.2) и (5.1) следует, что функция  $\psi(\vec{r})$  должна быть периодической с периодом решетки  $\vec{l}$ :

$$u_k(\vec{r} + \vec{l}) = u_k(\vec{r}).$$

Таким образом, условие (5.1) фактически означает, что решение уравнения Шредингера в поле с периодическим потенциалом должно иметь вид (5.2), где  $u_k(\vec{r})$  – функция, имеющая периодичность потенциала, т.е. периодичность решетки. Функции типа (5.2) называются функциями Блоха, а сама теорема Блоха обычно и формулируется в виде (5.2).

В одномерной решетке с периодом  $b$  соотношение (5.1) можно записать в виде

$$\psi_k(x+b) = \exp(ikb)\psi_k(x), \quad (5.3)$$

из которого сразу следует, что волновое число  $k$  определено не однозначно. В самом деле, если представить значение  $k$  в виде

$$k = k_0 + \frac{2\pi}{b}n,$$

где  $n$  – произвольное целое число, то из (5.3) следует:

$$\begin{aligned} \psi_k(x+b) &= \exp\left[i\left(k_0 + \frac{2\pi n}{b}\right)b\right]\psi_k(x) = \\ &= \exp(ik_0b)\exp(i2\pi n)\psi_k(x) = \exp(ik_0b)\psi_k(x). \end{aligned}$$

Последнее соотношение означает, что функция  $\psi_k$  удовлетворяет теореме Блоха так, как будто ей соответствует волновое число  $k_0$ . То есть каждой функции  $\psi_k$  соответствует множество возможных волновых чисел, отличающихся на  $2\pi n/b$ . Естественно, в качестве области изменения волнового числа следует выбрать область с наименьшим возможным изменением. Эта область изменения волнового числа называется зоной Бриллюэна. В частности, можно поступить так, чтобы точка  $k=0$  была точкой зеркальной симметрии. Другими словами, мы всегда будем выбирать для волнового числа  $k$  значение, которое лежит в интервале

$$-\frac{\pi}{b} < k < \frac{\pi}{b}.$$

Такая зона Бриллюэна называется основной. Ей соответствуют физически различные состояния.

### 5.3. ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Попытаемся теперь учесть влияние кристаллической решетки на поведение электронов. Рассмотрим вначале ситуацию при отсутствии внешнего электрического поля. Для простоты рассмотрим одномерный кристалл в виде цепочки нейтральных атомов (рис. 5.1). Запустим в решетку один электрон. Энергия его

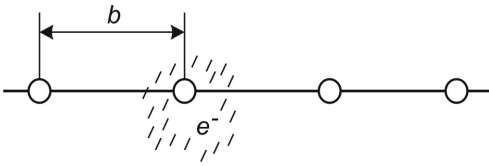


Рис. 5.1

взаимодействия с атомами представляет собой периодическую функцию:

$$U(x) = U(x + b).$$

Электрон может присоединиться к какому-либо атому и создать слабо свя-

занный отрицательный ион. Высота потенциального барьера связи атома и электрона больше, чем полная энергия электрона. За счет туннельного эффекта лишний связанный электрон может с некоторой вероятностью перейти к другому атому. Но к какому? Так как цепочка атомов бесконечно длинная, то вероятность переходов в обе стороны одинакова.

Поведение электрона в бесконечной цепочке атомов подчиняется уравнению Шредингера:

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

Здесь  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона (оператор энергии), равный

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x),$$

$U$  – потенциальная энергия взаимодействия электрона с атомами, для которой известно только то, что она подчиняется условию периодичности:

$$U(x) = U(x + b).$$

Пронумеруем все атомы цепочки по порядку:

$$\dots n-2, n-1, n, n+1, n+2 \dots$$

Понятно, что нам не удастся получить какое-либо решение уравнения Шредингера без подробной информации о виде потенциальной энергии взаимодействия электрона с атомами. Однако некоторые существенные выводы о поведении электрона можно получить и без подробного анализа уравнения Шредингера. С этой целью применим подход, рассмотренный в разделе «Операторный метод». В качестве базисных состояний  $\psi_\alpha$  выберем состояния

электрона, находящегося вблизи атома с номером  $n$  —  $\psi_n$ . С помощью этих базисных состояний можно описать любое состояние  $\psi$  одномерного кристалла, задав все амплитуды  $C_n$  того, что состояние  $\psi$  находится в одном из базисных состояний.

Запишем состояние  $\psi$  в виде суперпозиции базисных состояний  $\psi_n$ :

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n.$$

Кроме того, предположим, что когда электрон находится вблизи одного из атомов, то имеется некоторая вероятность его просачивания к атому слева или справа. Следуя Фейнману [3], рассмотрим простейший случай, когда электрон может просачиваться только к ближайшим соседям, а к следующему соседу он сможет пройти в два приема. Это будет означать, что в уравнении (1.10), записанном для какой-либо амплитуды  $C_n$ , в правой части необходимо оставить суммирование только по ближайшим соседям (по существу, аналогичная идея реализована в так называемом методе сильной связи). Таким образом, система уравнений, описывающих поведение электрона, приобретет вид:

$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = H_{n,n-1} C_{n-1} + H_{nn} C_n + H_{n,n+1} C_{n+1}, \quad (5.4)$$

где коэффициенты  $H_{nm}$  определяются соотношением

$$H_{nm} = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_m dx.$$

Трудность заключается в следующем: мы не знаем, что ставить вместо коэффициентов  $H_{nm}$  в уравнение (5.4). Но кое-что мы все же можем сказать. Предположим, что электрон оказался около какого-либо атома и у него нет шансов перебраться к соседу слева или справа. В этом случае  $H_{nm} = 0$  при  $n \neq m$ , и тогда коэффициент  $H_{nn}$  должен быть равен просто энергии  $E_0$ , которую имел бы электрон, если бы он не мог просачиваться от атома к атому. Причем совершенно неважно, что мы обозначим через  $E_0$ , реально это не означает ничего, кроме выбора нуля энергии. Коэффициенты же  $H_{n,n-1}$  и  $H_{n,n+1}$ , характеризующие вероятность

просачивания электрона к соседним атомам, без потери общности можно считать равными друг другу, и для удобства положим их равными отрицательному числу:

$$H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = -A.$$

В связи с принятыми обозначениями перепишем систему уравнений (5.4) в виде

$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = E_0 C_n - A C_{n+1} - A C_{n-1}. \quad (5.5)$$

Для полного описания поведения электрона необходимо для каждой из амплитуд  $C_n$  иметь по одному уравнению типа (5.5). В силу бесконечности цепочки атомов мы должны написать бесконечную систему уравнений! Выпишем только часть ее:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C_{n-1}}{\partial t} &= E_0 C_{n-1} - A C_{n-2} - A C_n \\ i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} &= E_0 C_n - A C_{n+1} - A C_{n-1} \\ i\hbar \frac{\partial C_{n+1}}{\partial t} &= E_0 C_{n+1} - A C_n - A C_{n+2} \end{aligned} \quad (5.6)$$

Попытаемся найти решение системы уравнений (5.6), соответствующее состояниям с определенной энергией  $E$ . Для этого возьмем решение в виде:

$$C_n = \varphi_n \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \quad (5.7)$$

Комплексное число  $\varphi_n$  дает не зависящую от времени часть амплитуды того, что электрон может быть обнаруженным возле  $n$ -го атома. После подстановки (5.7) в (5.6) приходим к бесконечной системе уравнений:

$$E\varphi_n = E_0\varphi_n - A\varphi_{n+1} - A\varphi_{n-1}. \quad (5.8)$$

Если считать, что  $n$ -й атом находится в точке с координатой  $x_n$ , а  $(n+1)$ -й атом – в точке с координатой  $x_{n+1} = x_n + b$ , то система уравнений (5.8) превращается в

$$E\varphi(x_n) = E_0\varphi(x_n) - A\varphi(x_n + b) - A\varphi(x_n - b). \quad (5.9)$$



В качестве пробного решения системы уравнений (5.9) выберем выражение

$$\varphi(x_n) = a \exp(ikx_n); \quad (5.10)$$

здесь  $k$  – чисто вещественное число и имеет смысл волнового числа, а сам множитель  $\exp(ikx_n)$  дает пространственную зависимость амплитуд (при этом мы фактически воспользовались теоремой Блоха). Подставляя (5.10) в (5.9) и сокращая на общий множитель  $\exp(ikx_n)$ , получаем:

$$E = E_0 - 2A \cos kb. \quad (5.11)$$

Посмотрим теперь, что же мы получили. Остановимся на двух моментах.

1. Амплитуда того, что электрон находится вблизи какого-либо определенного атома, определяется выражением

$$C_n \sim \exp(ikx_n) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right).$$

Вещественная и мнимая части этого выражения соответствуют волнам, движущимся по кристаллу либо вдоль оси  $X$ , либо против оси  $X$ , в зависимости от знака волнового числа  $k$ . Выбирая какое-либо значение  $k$ , мы получаем стационарное состояние с определенной энергией  $E$ . И в каждом таком состоянии вероятность обнаружить электрон возле любого атома совершенно одинакова и со временем не изменяется. Т.е. электрон за счет просачивания может равновероятно оказаться возле любого атома. А это означает, что в периодическом поле бесконечно длинной решетки электрон чувствует себя абсолютно свободным и может легко пройти через кристалл, даже если ему приходится взаимодействовать с атомами. Т.е. в идеальной решетке электрон не испытывает никакого сопротивления. Конечно, понятие абсолютно свободного электрона достаточно условно. Позднее мы увидим, что придется видоизменить понятие массы электрона (будет введено понятие эффективной массы).

2. Для свободного электрона в вакууме существует параболическая зависимость энергии от волнового числа:  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Для стационарных состояний электрона в идеальной решетке зависимость  $E(k)$  имеет принципиально другой вид и совпадает

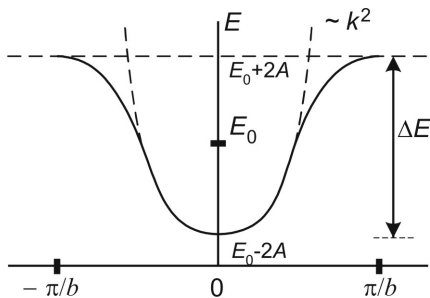


Рис. 5.2

с параболической только при малых  $k$  (рис. 5.2). Это легко получить, если разложить выражение (5.11) в ряд по малым  $k$ . Кроме того, отсюда же видно, что знак коэффициента  $A$  в выражении (5.11) должен быть положительным.

Энергия  $E_0$  соответствует энергии электрона, который не смог бы просачиваться от одно-

го атома к другому (бесконечно высокий потенциальный барьер). Из рисунка видно, что электроны в решетке могут иметь энергию в пределах полосы  $\Delta E$ , т.е. им разрешены только эти значения энергии и никакие другие. Ширина полосы разрешенных значений энергии электрона  $\Delta E$  определяется вероятностью перескакивания электрона от атома к атому, расстоянием между атомами и не зависит от размеров кристалла. Значения волнового числа, большие, чем  $\pi/b$ , рассматривать не стоит, они не приводят к каким-либо новым состояниям, а просто повторяют те состояния, которые уже появлялись при меньших  $k$ . Поэтому можно ограничить изменения  $k$  основной зоной Бриллюэна.

#### 5.4. РАССЕЯНИЕ И ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ НА НЕРЕГУЛЯРНОСТЯХ РЕШЕТКИ

Наш первоначальный анализ привел к выводу, что у идеальных кристаллов и проводимость идеальна, т.е. электроны могут двигаться по кристаллу совершенно свободно.

Рассмотрим теперь одиночный электрон в неидеальном кристалле. Пусть, например, один атом — «не тот», атом примеси, обладающий другой глубиной потенциальной ямы, чем атомы основной матрицы. Здесь возможны два варианта.

Первый вариант. Энергия атома примеси (пусть его номер — «нуль») несколько выше, чем у основных атомов. Обозначим эту энергию  $E_0 + F$ . Будем исходить из системы уравнений, похожей

на (5.8), за одним исключением: уравнение при  $n=0$  не похоже на остальные.

$$\begin{aligned}
 E\varphi_{-2} &= E_0\varphi_{-2} - A\varphi_{-1} - A\varphi_{-3} \\
 E\varphi_{-1} &= E_0\varphi_{-1} - A\varphi_0 - A\varphi_{-2} \\
 E\varphi_0 &= (E_0 + F)\varphi_0 - A\varphi_1 - A\varphi_{-1} \\
 E\varphi_1 &= E_0\varphi_1 - A\varphi_2 - A\varphi_0 \\
 E\varphi_2 &= E_0\varphi_2 - A\varphi_3 - A\varphi_1 .
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

Конечно, для общности полагалось бы писать разные  $A$ , в зависимости от того, прыгает ли электрон к атому с номером «нуль» или же от атома «нуль», но суть происходящего можно увидеть из упрощенного примера.

Выражение  $\varphi(x_n) = a \exp(ikx_n)$ , представляющее волну, бегущую в направлении оси  $X$ , по-прежнему будет являться решением для всех этих уравнений, кроме уравнения для атома «нуль». Логично попробовать в качестве общего решения всей системы уравнений взять сумму бегущих волн вдоль оси  $X$  и против оси  $X$ :

$$\begin{aligned}
 \varphi_n &= \alpha \exp(ikx_n) - \beta \exp(-ikx_n), \quad (n < 0) \\
 \varphi_n &= \gamma \exp(ikx_n), \quad (n > 0)
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

(знак «минус» перед вторым слагаемым в первом уравнении обусловлен чисто формальными соображениями).

В этом случае можно показать, что выражения (5.13) являются решением для всей бесконечной совокупности уравнений (5.12), включая и атом «нуль», при условии, что энергия электрона, как и раньше, равна

$$E = E_0 - 2A \cos kb .$$

А это означает, во-первых, что «падающая волна» с некоторой амплитудой, которую, не теряя общности, можно положить равной единице, приближается к атому «нуль» (или «рассеивателю») слева. При этом «рассеянная», или «отраженная», волна с амплитудой  $\beta$  бежит обратно. Кроме того, появляется и «проходящая»

волна с амплитудой  $\gamma = 1 - \beta$ . Амплитуда «отраженной» волны зависит от параметра  $F$ :

$$\beta = \frac{F}{F - 2iA \sin kb}.$$

Все это очень похоже на прохождение частицей потенциально-го барьера, которое рассматривалось раньше. Во-вторых, энергетический спектр, оставаясь непрерывным, располагается в той же полосе разрешенных значений энергии, что и для идеальной решетки.

Второй вариант. Предположим теперь, что энергия электрона в атоме примеси (при  $n = 0$ ) ниже, чем где-либо в другом месте. В этом случае электрон может оказаться захваченным этим атомом. Иначе говоря, если  $E_0 + F$  ниже дна полосы разрешенных значений энергии для идеальной решетки (меньше, чем  $E_0 - 2A$ ), то электрон может оказаться «пойманным» в состоянии с энергией  $E < E_0 - 2A$ . Понятно, что выражения типа  $\exp(-ikx_n)$  с действительными значениями  $k$  не могут описывать состояние «захваченного» электрона. Но это можно получить, если разрешить  $k$  принимать мнимые значения. Пусть  $k = i\chi$ . Для  $n < 0$  допустимое решение может иметь вид:

$$\varphi_n(n < 0) = a \exp(\chi x_n). \quad (5.14)$$

В экспоненте необходимо брать «плюс», иначе амплитуда при больших отрицательных  $x_n$  станет бесконечно большой. Аналогично, при  $n > 0$  решение имеет вид:

$$\varphi_n(n > 0) = a' \exp(-\chi x_n). \quad (5.15)$$

Если подставить эти пробные решения в (5.12), то они удовлетворят всем уравнениям, кроме средней тройки, при условии:

$$E = E_0 - A[\exp(\chi b) + \exp(-\chi b)]. \quad (5.16)$$

Оставшейся тройке уравнений (5.12) можно удовлетворить, если положить  $a = a'$  и значение  $\chi$  выбрать так, чтобы выполнилось условие:

$$A[\exp(\chi b) - \exp(-\chi b)] = -F. \quad (5.17)$$

Из соотношений (5.16) и (5.17) можно найти и энергию захваченного электрона:

$$E = E_0 \pm \sqrt{4A^2 + F^2}. \quad (5.18)$$

Так как ранее мы полагали, что энергия захваченного электрона должна быть меньше, чем  $E_0 - 2A$ , то в выражении (5.18) следует оставить знак «минус». Что делать со знаком «плюс», поймем позднее! Таким образом, энергия пойманного вблизи атома примеси электрона должна быть равна

$$E = E_0 - \sqrt{4A^2 + F^2}.$$

Из приведенного анализа следует, во-первых, что захваченный электрон обладает одной-единственной энергией, а не полосой, и эта энергия расположена несколько ниже полосы проводимости. Во-вторых, экспоненциальные решения типа (5.14) и (5.15) не утверждают, что захваченный электрон сидит прямо в атоме примеси. Вероятность обнаружить его у соседних атомов дается квадратом этих амплитуд, и только с наибольшей вероятностью электрон можно встретить вблизи атома примеси. Для соседних атомов вероятность спадает экспоненциально по мере удаления от атома примеси. Это новый пример «проникновения через барьер». С точки зрения классической физики, электрону попросту не хватило бы энергии, чтобы удалиться от энергетической ямы.

## 5.5. ДИНАМИКА ПОВЕДЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В РЕШЕТКЕ

Включим теперь внешнее электрическое поле. Для описания динамики поведения электрона необходимо иметь более определенное представление о положении электрона. Это означает, что мы должны наложить ограничения на значения координаты. При этом появляется конечное значение неопределенности его координаты  $\Delta x$ . Это автоматически, в силу соотношения неопределенности, должно привести к неопределенности импульса  $\Delta p$  и связанной с ней неопределенности волнового числа  $\Delta k$ . Такие состояния уже нельзя описывать волновой функцией вида

$\psi = a \exp[-i(\omega t - kx)]$ . Волновая функция теперь будет представлять суперпозицию плоских волн:

$$\psi = \sum_{\Delta k} a \exp[-i(\omega t - kx)].$$

Вспомним, что при наложении гармонических волн с близкими значениями волнового числа образуется «волновой пакет». Скорость перемещения «волнового пакета» называется групповой скоростью:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk}.$$

Наиболее вероятное положение электрона совпадает с центром этого пакета. Следовательно, групповая скорость и представляет собой скорость электрона. Найдём её значение:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}.$$

Найдём теперь ускорение электрона  $\frac{dv_{\text{гр}}}{dt}$ :

$$\frac{dv_{\text{гр}}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left( \frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}.$$

Так как  $k = p/\hbar$ , то  $\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{dp}{dt}$ . По второму закону Ньютона производная от импульса – это сила со стороны внешнего поля, поэтому

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \frac{dv_{\text{гр}}}{dt}.$$

Данное соотношение отражает второй закон Ньютона, в котором величина

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \quad (5.19)$$

играет роль массы и называется эффективной массой электрона.

Итак, если на электрон не действуют внешние силы, то он движется свободно (приближение свободных электронов), его положение в кристалле равновероятно в любой точке. Динамика движения электрона под действием внешнего электрического поля определяется не истинной массой электрона, а введенной выше эффективной массой, которая может не иметь ничего общего с обычной массой. В частности, эффективная масса может зависеть от направления движения электрона в кристаллической решетке.

Обратимся теперь к зависимости  $E(k)$ . При малых значениях волнового числа, т.е. вблизи дна разрешенной зоны, энергия пропорциональна  $k^2$ . Тогда  $d^2E/dk^2 = \text{const}$  и  $m^* \cong m$ . В точке перегиба  $d^2E/dk^2 = 0$  и  $m^* \rightarrow \infty$ , т.е. внешнее поле неспособно изменить скорость электрона (точка перегиба как раз и соответствует значению  $E_0$ , при котором электрон неспособен просачиваться от одного атома к другому). Вблизи «потолка» разрешенной зоны  $d^2E/dk^2 < 0$ , а это означает, что эффективная масса электрона отрицательна, и под совместным действием поля решетки и внешнего поля электрон получает ускорение, обратное внешней силе (это приведет нас к понятию «дырки»).

## 5.6. ЭЛЕКТРОН В ТРЕХМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ

Посмотрим теперь, что происходит с электроном в трехмерной решетке. Пусть имеется прямоугольная решетка атомов с расстояниями  $a, b, c$  в трех направлениях (для кубической решетки  $a = b = c$ ). Если выбрать начало координат в одном из атомов, то координаты всех других атомов можно представить в виде

$$x = n_x a, \quad y = n_y b, \quad z = n_z c,$$

где  $n_x, n_y, n_z$  — некоторые целые числа.

Как и прежде, будем полагать, что связанный электрон с некоторой вероятностью может перепрыгнуть к другому атому, только теперь эти вероятности в направлении  $X, Y, Z$  будут в общем случае разными, но, как и ранее, будем полагать:

$$U(x) = U(x + a), \quad U(y) = U(y + b), \quad U(z) = U(z + c).$$

При этих предположениях система уравнений (5.6) будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C(x, y, z)}{\partial t} = & E_0 C(x, y, z) - A_x C(x + a, y, z) - \\ & - A_x C(x - a, y, z) - A_y C(x, y + b, z) - A_y C(x, y - b, z) - \\ & - A_z C(x, y, z + c) - A_z C(x, y, z - c), \end{aligned} \quad (5.20)$$

где, как и прежде, амплитуды  $C$  могут меняться во времени, а коэффициенты  $A_x, A_y, A_z$  определяют теперь вероятность просачивания электрона в направлениях  $X, Y, Z$ .

Как и ранее, будем искать решение этой системы уравнений в виде:

$$C(x, y, z) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \exp(ik_x x + ik_y y + ik_z z), \quad (5.21)$$

где  $k_x, k_y, k_z$  – компоненты трехмерного вектора  $\vec{k}$ . Это легко понять, если выражение (5.21) переписать в векторных обозначениях:

$$C = \exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right) \exp(-i\vec{k}\vec{r}).$$

После подстановки (5.21) в (5.20) для энергии электрона можно получить выражение:

$$E = E_0 - 2A_x \cos k_x a - 2A_y \cos k_y b - 2A_z \cos k_z c. \quad (5.22)$$

Из данного выражения видно, что в трехмерной решетке энергия электрона зависит уже от трех волновых чисел  $k_x, k_y, k_z$  достаточно сложным образом. Характер изменения энергии зависит от относительных знаков и величин  $A_x, A_y, A_z$ , но значения энергии в любом случае находятся в пределах некоторой полосы разрешенных значений энергии, как и для одномерной решетки атомов.



Если тройка величин  $A_x, A_y, A_z$  положительна и нас интересуют малые значения  $\vec{k}$ , то, разлагая косинус в ряд, как и ранее, приходим к параболической зависимости энергии от волнового числа:

$$E = A_x a^2 k_x^2 + A_y b^2 k_y^2 + A_z c^2 k_z^2$$

(здесь энергия отсчитывается от дна разрешенной зоны).

В простой кубической решетке  $a = b = c$ , и следует ожидать, что и  $A_x$ , и  $A_y$ , и  $A_z$  будут также равны друг другу. В этом случае энергия будет пропорциональна квадрату волнового числа  $\vec{k}$ .

Оценим ширину зоны проводимости в кубическом кристалле с постоянной решетки  $a = 3 \cdot 10^{-10}$  м, используя закон дисперсии (5.22). Будем полагать  $E_0 > 0$  и эффективную массу электрона  $m^*$  вблизи дна зоны проводимости равной массе свободного электрона. Для этого представим закон дисперсии (5.22) несколько в другом виде:

$$E(k) = E_0 [3 - \cos k_x a - \cos k_y a - \cos k_z a].$$

«Потолок» (максимальное значение энергии) зоны проводимости достигается при  $k_x = \pm\pi/a$ ,  $k_y = \pm\pi/a$ ,  $k_z = \pm\pi/a$ , а «дно» (минимальное значение энергии) – при  $k = 0$ . При этом  $E_{\max} = 6E_0$ ,  $E_{\min} = 0$ . Ширина зоны  $\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 6E_0$ . Рассчитаем теперь по формуле (5.19) эффективную массу электрона вблизи дна зоны:

$$m_i^* = \left( \frac{\partial^2 E}{\hbar^2 \partial k_i^2} \right)^{-1} \text{ при } k_i \rightarrow 0 (i = \{x, y, z\}).$$

После дифференцирования получаем:  $m^* = m_e = \hbar^2 / E_0 a^2$ , откуда находим  $\Delta E = 6\hbar^2 / m_e a^2 = 5$  эВ.

В кристаллах некубической системы различие коэффициентов  $A_x, A_y, A_z$  приводит к тому, что «эффективная масса» электрона становится зависящей от направления его движения.

Посмотрим теперь, что произойдет, если один из атомов заметить на атом примеси с другим значением энергии. Вот теперь ситуация меняется коренным образом! Если в одномерной цепочке атомов электрон никак не мог «проскочить» мимо атома примеси, то в трехмерной решетке такая возможность у него уже появляется. А это означает, что теперь прежней альтернативы по поводу разрешенных значений энергии уже не существует.

В одномерной решетке электрон либо рассеивается на атоме примеси с сохранением зоны разрешенных значений энергии, либо появляется связанное состояние с одним-единственным значением энергии ниже полосы проводимости.

В трехмерной решетке у электрона сохраняется и та, и другая возможность! Т.е. энергетический спектр электрона должен иметь вид непрерывной полосы разрешенных значений энергии и одиночного уровня, расположенного несколько ниже полосы проводимости.

## 5.7. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Попытаемся теперь понять, как влияет взаимодействие между электронами на их энергетический спектр.

Каждый электрон, как мы уже знаем, может иметь любую энергию в пределах разрешенной зоны (в этом проявляется периодичность потенциальной энергии взаимодействия электрона с атомами решетки). Если теперь в кристалл внести два электрона, то их взаимодействие приведет к тому, что вместо одного уровня энергии появятся два (так происходит расщепление уровней энергии). Это происходит потому, что каждый энергетический уровень соответствует определенному значению волнового числа, т.е. определенному состоянию электрона. В силу принципа запрета Паули два электрона не могут находиться одновременно в одном состоянии, следовательно, не могут и иметь одинаковую энергию. С учетом спина электрона на любом уровне энергии могут находиться только два электрона, обладающих противоположными спинами.

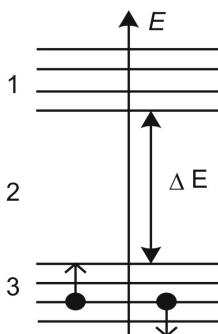


Рис. 5.3

При сближении  $N$  атомов вместо одного уровня энергии возникает  $N$  уровней, расположенных в пределах разрешенной зоны. Таких разрешенных зон может быть несколько (рис. 5.3), т.к. каждая зона образуется из отдельного уровня энергии атома, а таких уровней может быть несколько. Ширина разрешенной зоны энергии от размеров кристалла не зависит и обычно бывает порядка

нескольких электрон-вольт. И если в кристалле порядка  $10^{23}$  атомов, то расстояние между соседними уровнями из-за сближения атомов в зоне будет порядка  $10^{-23}$  эВ. На рис. 5.3 цифрами 1 и 3 обозначены разрешенные зоны, цифрой 2 – запрещенная зона ( $\Delta E$  – ширина запрещенной зоны). Первая зона при абсолютном нуле температуры свободна от электронов, третья зона может быть частично или полностью заполнена электронами и называется валентной, т.к. возникает из уровня, на котором находятся валентные электроны в основном состоянии атома.

В зависимости от степени заполнения электронами валентной зоны и ширины запрещенной зоны могут быть реализованы три варианта:

1. Часть уровней валентной зоны свободна. Достаточно сообщить электронам энергию порядка  $10^{-23}$  эВ, и они могут занять более высокие уровни энергии. Это происходит, например, за счет теплового движения (энергия теплового движения на 1К – порядка  $10^{-4}$  эВ). Электрическое поле также способно переводить электроны на более высокие уровни, и они приобретают дополнительную скорость в направлении, противоположном электрическому полю. Такие вещества являются металлами – хорошими проводниками. Для них валентная зона – это зона проводимости. Иногда имеет место перекрывание зон (запрещенная зона отсутствует).

2. Валентная зона заполнена полностью. Электрическое поле не способно сообщить электронам энергию, достаточную для преодоления запрещенной зоны. Если ширина запрещенной зоны  $\Delta E$  невелика ( $\Delta E < 1$  эВ), то только энергия теплового движения способна перевести электроны в свободную зону – она становится зоной проводимости (на самом деле не только энергия теплового движения способна перевести электроны в зону проводимости; об этом позднее). Такие вещества являются полупроводниками.

3. Ширина запрещенной зоны  $\Delta E$  составляет несколько электрон-вольт. Валентная зона заполнена полностью. В этом случае ни тепловое движение, ни электрическое поле не способны сообщить энергию, достаточную для переброса электронов в свободную зону; это диэлектрики. В них электроны настолько связаны, настолько «заперты», что даже сильные поля не могут помочь им вырваться. И только кванты жесткого электромагнитного излучения могут дать им свободу.

## 5.8. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ

Ранее мы показали, что в случае идеальной кристаллической решетки электроны не испытывают при своем движении никакого сопротивления и электропроводность металлов должна быть бесконечно большой. Это связано с тем, что имеется перекрытие волновых функций между соседними атомами решетки, и за счет туннельного эффекта электрон с равной вероятностью может оказаться в любом месте решетки. И только за счет рассеяния электронов на атомах примеси и тепловых колебаний решетки появляется электрическое сопротивление.

Удельное сопротивление при ненулевой температуре складывается из двух слагаемых: сопротивление, определяемое наличием примесей ( $\rho_{\text{прим}}$ ), и сопротивление, обусловленное тепловыми колебаниями решетки ( $\rho_{\text{колеб}}$ ):

$$\rho = \rho_{\text{прим}} + \rho_{\text{колеб}} .$$

При нулевой температуре исчезает сопротивление, обусловленное тепловыми колебаниями решетки, но остается сопротивление, обусловленное примесями и искажениями решетки.

Введем понятие дрейфовой скорости:

$$\vec{v}_{\text{др}} = \frac{1}{n} \sum \vec{v}_i , \quad (5.23)$$

где сумма берется по всем электронам металла ( $n$  – их число).

При отсутствии внешнего электрического поля скорость дрейфа обращается в нуль и электрический ток отсутствует. При наложении электрического поля  $\vec{v}_{\text{др}}$  становится отличной от нуля и появляется электрический ток. Кроме кулоновских сил ( $-eE$ ), существуют силы сопротивления, пропорциональные дрейфовой скорости:

$$F_{\text{сопр}} = -r \vec{v}_{\text{др}} ,$$

где  $r$  играет роль коэффициента сопротивления движению электронов.

Запишем уравнение движения электрона с эффективной массой  $m^*$ , движущегося со скоростью  $\vartheta_{\text{др}}$ :

$$m^* \frac{d\vartheta_{\text{др}}}{dt} = -eE - r\vartheta_{\text{др}}.$$

При отсутствии внешнего поля ( $E = 0$ ) это уравнение имеет решение:

$$\vartheta_{\text{др}} = \text{const} \exp\left(-\frac{r}{m^*}t\right).$$

Отношение  $\frac{m^*}{r} = \tau$  называется временем релаксации и показывает, как быстро уменьшается скорость дрейфа при выключении электрического поля. Установившееся значение скорости дрейфа равно

$$\vartheta_{\text{др}} = -\frac{eE\tau}{m^*}.$$

И для плотности тока ( $j = ne\vartheta$ ) получаем выражение

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m^*} \vec{E}.$$

Аналогичное выражение существует и в классической теории электропроводности металлов, только ранее сюда входила масса электрона и среднее время свободного пробега электрона. Соответствующий квантовомеханический расчет дает линейную зависимость удельного сопротивления от температуры, что соответствует опыту (в «классике» сопротивление пропорционально корню из температуры!).

Различие классической и квантовомеханической трактовок, описывающих движение электронов проводимости в металле, сводится к следующему. При классическом рассмотрении предполагается, что все электроны возмущаются внешним электрическим полем. Это приводит к тому, что каждое слагаемое в (5.23) получает добавку в направлении, противоположном полю. При квантовомеханической трактовке возмущаются полем и изменяют свою скорость лишь электроны, занимающие состояния вблизи уровня

Ферми. Электроны, находящиеся на более глубоких уровнях, полем не возмущаются, и их вклад в сумму (5.23) не изменяется. Кроме того, на динамику движения электронов оказывает влияние не обычная масса электрона, а его эффективная масса.

## 5.9. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

Температурная зависимость сопротивления большинства металлов (рис. 5.4) имеет почти линейный характер (кривая 1), где  $\rho_{\text{ост}}$  зависит от количества примесей и остаточных напряжений. Если убрать примеси и снять остаточные напряжения, то  $\rho_{\text{ост}} \rightarrow 0$ .

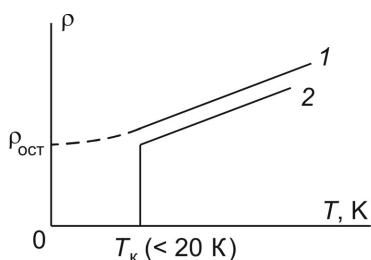


Рис. 5.4

Некоторые же металлы (Hg, Sn, Al, Pb...) ведут себя иначе (кривая 2). Сопротивление при температуре ниже критической ( $T_{\text{к}}$ ) резко падает до нуля. Это называется явлением сверхпроводимости; его впервые обнаружил Камерлинг-Оннес в 1911 г. Для иллюстрации: в сверхпроводящем состоянии  $\rho \approx 10^{-23} \text{ Ом}\cdot\text{см}$  (меньше, чем сопротивление меди при  $20^\circ\text{C}$ ,

в  $10^{17}$  раз). Время, требуемое для затухания тока, наведенного в сверхпроводящем колечке, составляет порядка ста тысяч лет! Кроме отсутствия сопротивления, есть эффект Мейснера – выталкивание магнитного поля из сверхпроводника. Формально это выглядит так, как будто магнитная проницаемость обращается в нуль при температурах ниже критической, и в этом случае вещество становится идеальным диамагнетиком. Связано это с тем, что в тонком поверхностном слое сверхпроводника, помещенного в слабое магнитное поле, наводятся циклические незатухающие токи, компенсирующие внешнее магнитное поле. При значении поля, превышающем некоторое критическое, сверхпроводящее состояние разрушается и магнитное поле проникает внутрь. Сверхпроводящее состояние также разрушается если через образец пропускать ток, больший критического.

Объяснение сверхпроводимости было дано только в 1957 году Бардиным, Купером, Шриффером. Кратко суть сводится к следующему. При движении электрона сквозь кристаллическую решетку происходит поляризация среды: электрон стягивает на себя облако положительно заряженных ионов. Первого электрона уже и «след простыл», а облако еще остается (из-за малых тепловых колебаний решетки). Это облако притягивает к себе другой электрон, причем сила притяжения превышает силу кулоновского отталкивания между электронами. Образуется пара электронов с размерами, значительно превышающими расстояние между атомами. Такая пара получила название куперовской пары. Несколько таких пар могут перекрыть образец.

Взаимодействие между электронами за счет поляризации среды наиболее сильно проявляется у электронов, обладающих противоположными спинами. Поэтому спин куперовской пары становится равным нулю, значит, для них не работает принцип запрета Паули, который не дает электронам скапливаться в одном состоянии. Если каждый из электронов этой пары подчиняется статистике Ферми, то сама куперовская пара подчиняется теперь статистике Бозе. В сверхпроводящем состоянии в энергетическом спектре электронов вблизи уровня Ферми появляется энергетическая щель, отделяющая уровень, на котором находятся куперовские пары  $E_{\text{кп}}$ , от ближайшего разрешенного уровня. Энергия взаимодействия пары с решеткой меньше ширины этой щели (при температуре ниже критической), поэтому куперовские пары двигаются по металлу совершенно свободно.

Удивительные свойства сверхпроводящего состояния делают сверхпроводники чрезвычайно перспективным материалом для науки и техники. Исчезновение сопротивления сводит к нулю выделение тепла в проводнике. Кроме того, появляется возможность создания мощных магнитных полей (для создания управляемого термоядерного синтеза, поездов на магнитных подушках и т.д.). Т.е. сверхпроводники – крайне заманчивая вещь, но практическое их применение сдерживалось до тех пор, пока отсутствовали материалы, переходящие в сверхпроводящее состояние при приемлемых температурах (критическая температура была около 20 К – это близко к температуре кипения жидкого водорода и неона, чтобы их можно было применять для охлаждения).

Температура кипения гелия мала, но это слишком дорого для практического использования. Пределом, к достижению которого стремились, являлась температура кипения жидкого азота (77 К). За 75 лет после открытия сверхпроводимости удалось достичь только температуры 23 К (слишком медленный прогресс!). И только в конце 1986 г. в лабораториях США и Швейцарии были получены сверхпроводящие керамические оксидные образцы на основе лантана (La, Ba, Cu, O) и иридия (Y, Ba, Cu, O) с критической температурой около 40 К. Это была настоящая научная сенсация. В 1987 г. в университете Хьюстона были получены сверхпроводники Bi-Ba-Ca-Cu-O и Tl-Ba-Ca-Cu-O с критической температурой 105–125 К. В принципе, никаких разумных ограничений для значения критической температуры не существует, так что, по-видимому, возможно создание сверхпроводящих материалов, работающих и при комнатных температурах.

### ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ

#### «РАССЕЯНИЕ И ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ НА НЕРЕГУЛЯРНОСТЯХ РЕШЕТКИ»

5.1. Показать, что при рассеянии электрона на атоме примеси с энергией выше, чем энергия основных атомов, выражения  $\varphi_n = \alpha \exp(ikx_n) - \beta \exp(-ikx_n)$ , ( $n < 0$ ) и  $\varphi_n = \gamma \exp(ikx_n)$ , ( $n > 0$ ) действительно являются решением системы уравнений (5.12) при условии, что энергия электрона равна  $E = E_0 - 2A \cos kb$ .

5.2. Показать, что амплитуда отраженной волны при рассеянии на атоме примеси с энергией  $E_0 + F$  равна  $\beta = \frac{F}{F - 2iA \sin kb}$ .

5.3. Показать, что если энергия захваченного электрона на атоме примеси ниже дна полосы разрешенных значений энергии для идеальной решетки, то выражения  $\varphi_n (n < 0) = a \exp(\chi x_n)$  и  $\varphi_n (n > 0) = a' \exp(-\chi x_n)$  при  $a = a'$  являются решением системы уравнений (5.12), а сама энергия электрона может быть найдена по формуле

$$E = E_0 - \sqrt{4A^2 + F^2}.$$



## 6. ПОЛУПРОВОДНИКИ

### 6.1. СОБСТВЕННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ. ЭЛЕКТРОНЫ И ДЫРКИ

Полупроводники по проводимости занимают промежуточное положение между металлами и изоляторами – В, С, Si, P, S, Ge, As. Их главная особенность – чрезвычайно высокая чувствительность проводимости к внешним воздействиям (температура, давление, примеси, электромагнитное излучение и т.д.). Например, удельное сопротивление кремния при повышении температуры от 293 К до 973 К падает в  $6 \cdot 10^5$  раз.

Мы уже знаем, что полупроводниками являются кристаллические вещества, у которых валентная зона полностью заполнена электронами, а ширина запрещенной зоны  $\Delta E_{\text{щели}}$  невелика. Например,  $\Delta E_{\text{щели}}$  для кремния около 1,1 эВ,  $\Delta E_{\text{щели}}$  для германия около 0,72 эВ.

Различают собственные и примесные полупроводники.

Собственные полупроводники – химически чистые полупроводники.

Примесные полупроводники – полупроводники с различными примесями.

Рассмотрим сначала механизм собственной проводимости полупроводников. При абсолютном нуле температуры валентная зона заполнена полностью, зона проводимости свободна (рис. 6.1). Обычного электрического поля недостаточно для переброса электронов из валентной зоны в зону проводимости. Поэтому при нулевой температуре собственные полупроводники должны вести себя как изоляторы.

Представим, что каким-то образом (как – рассмотрим позднее) удалось перебросить электрон из валентной зоны в зону проводимости. Тогда

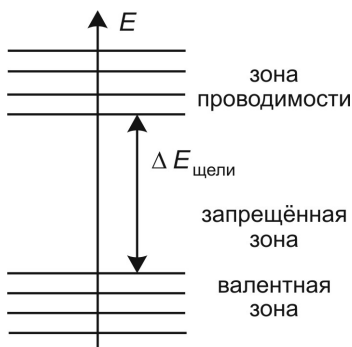


Рис. 6.1

в зоне проводимости появляется электрон, свободный от атома и способный под действием электрического поля перемещаться по кристаллу. В валентной же зоне образуется вакантный уровень, на который могут попасть другие электроны. Таким образом, электропроводность полупроводника становится не равной нулю.

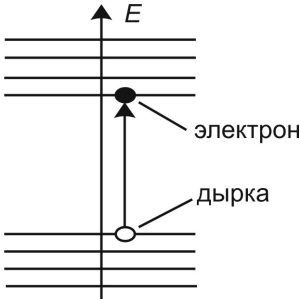


Рис. 6.2

При наличии вакантных уровней в валентной зоне поведение электронов валентной зоны (т.е. связанных с атомами) можно представить как движение положительно заряженных квазичастиц – «дырок» (рис. 6.2). К понятию дырки можно прийти иначе. Вспомним, что эффективная масса электрона  $m^*$  у потолка энергетической зоны отрицательна. Отсутствие частицы с отрицательным зарядом  $(-e)$  и отрицательной массой эквивалентно наличию частицы с положительной массой и положительным зарядом – т.е. опять приходим к понятию «дырки»!

Если в зоне проводимости нет свободных электронов и валентная зона заполнена полностью, т.е. в ней нет «дырок», то проводимость полупроводника равна нулю. А это означает, что  $\sum \vec{\vartheta}_i = 0$  (сумма берется по всем электронам валентной зоны). После перевода электрона с номером  $k$  из валентной зоны в зону проводимости эта сумма может быть расписана иначе:

$$\sum_{i \neq k} (\vec{\vartheta}_i + \vec{\vartheta}_k) = 0 \rightarrow \sum_{i \neq k} \vec{\vartheta}_i = -\vec{\vartheta}_k,$$

а это означает, что сумма скоростей всех электронов валентной зоны равна скорости выброшенного в зону проводимости электрона, взятого со знаком «минус». Все эти электроны валентной зоны создадут ток, равный  $J = (-e)(-\vartheta_k) = e\vartheta_k$ . Этот ток эквивалентен току, который создавала бы частица с зарядом  $+e$  и имеющая скорость, противоположную скорости отсутствующего электрона. Такая частица и получила название «дырка» (в дальнейшем кавычки будем опускать).

Если к кристаллу приложить электрическое поле, то электроны начинают смещаться против поля, а дырки вдоль поля. Начинается дрейф электронов к положительному полюсу, а дырок – к отрицательному.

Таким образом, **собственная проводимость полупроводников обусловлена движением электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне.**

Как создать пару электрон – дырка? Есть несколько вариантов. Рассмотрим один из них.

Направим на полупроводник поток квантов электромагнитного излучения ( $\gamma$ -квантов). Если энергия фотона больше  $\Delta E_{\text{щели}}$  (ширины запрещенной зоны), то образуется пара электрон – дырка. Быстрота образования пар пропорциональна интенсивности излучения. Если к полупроводнику приложить электрическое поле, то в цепи образуется электрический ток, пропорциональный интенсивности света – так возникает явление фотопроводимости.

Пусть на полупроводник падает поток частиц высоких энергий (протонов, пионов...). Электрическое поле пролетающих через кристалл частиц вырывает электроны из связанных состояний, образуя пару электрон – дырка. Пролет частиц высоких энергий рождает электрический импульс в кристалле – на этом принципе работают полупроводниковые счетчики.

До сих пор мы рассматривали свойства полупроводников при нулевой температуре. При температурах, отличных от нуля, есть другой механизм образования пар электрон – дырка. Тепловые колебания решетки могут вызвать самопроизвольное рождение пары электрон – дырка. Т.е. попросту говоря, электрон, получая тепловую энергию решетки, способен оторваться от атома и перейти в зону проводимости. Одновременно с этим рождается дырка.

Вероятность образования пары электрон – дырка  $P_{\text{пары}}$  пропорциональна вероятности того, что вблизи какого-либо атома сосредоточится энергия, которая больше или равна  $\Delta E_{\text{щели}}$ . По распределению Больцмана,

$$P_{\text{пары}} \sim \exp(-\Delta E_{\text{щели}} / kT) .$$

Наряду с образованием пар происходит обратный процесс встречи электрона и дырки, а освобожденная энергия переходит к решетке. Этот процесс называется рекомбинацией электрона

и дырки. Вероятность рекомбинации  $P_{\text{рек}}$  пропорциональна как числу электронов, так и числу дырок:  $P_{\text{рек}} \sim n_n n_p$  ( $n_n$  – число электронов в единице объема – отрицательных, негативных носителей заряда,  $n_p$  – число положительных, позитивных носителей заряда – дырок).

При равновесии скорость образования пар должна быть равна скорости рекомбинации. Это приводит к следующему соотношению:

$$n_p n_n = \text{const} \cdot \exp(-\Delta E_{\text{щели}} / kT),$$

где  $\text{const}$  слабо зависит от температуры.

Если взять совершенно чистое вещество, то число положительных и отрицательных носителей заряда будет одинаковым. Значит, каждое из них меняется по закону

$$n \sim \exp(-\Delta E_{\text{щели}} / 2kT).$$

Поскольку удельная проводимость  $\sigma$  пропорциональна числу носителей заряда, то

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta E_{\text{щели}} / 2kT)$$

и быстро растет с увеличением температуры. Экспериментальную зависимость проводимости от температуры удобно строить в логарифмических координатах (рис. 6.3).

Наклон прямой определяется шириной запрещенной зоны, что позволяет экспериментально измерить  $\Delta E_{\text{щели}}$ .

На рис. 6.4 отображены процессы рождения и рекомбинации пары электрон – дырка как в пространстве (рис. 6.4, а), так и на энергетической диаграмме (рис. 6.4, б).

Стрелкой 1 показан процесс рождения пары электрон-дырка, стрелкой 3 – процесс рекомбинации, стрелка 2 отображает перемещение электрона по валентной зоне.

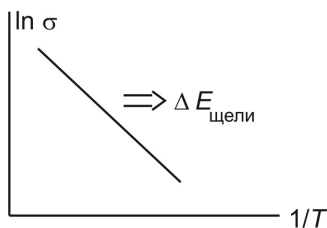


Рис. 6.3

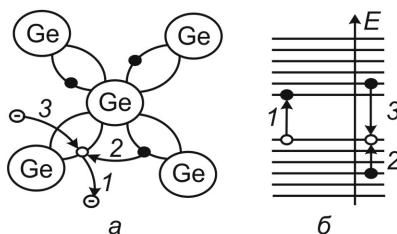


Рис. 6.4

## 6.2. ПРИМЕСНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Кроме собственной проводимости, полупроводники обладают еще и примесной проводимостью. Она возникает, если некоторые атомы данного полупроводника заменить в узлах кристаллической решетки атомами, валентность которых отличается на единицу от валентности основных атомов.

Заменим в решетке германия один атом Ge атомом мышьяка As (рис. 6.5). Германий четырехвалентен, мышьяк – пятивалентен. Для образования ковалентных связей с четырьмя атомами Ge мышьяку необходимо только четыре электрона, пятый оказывается лишним. Он слабо связан с ядром, легко отщепляется от атома и начинает блуждать по кристаллу. Появление лишнего электрона не сопровождается появлением дырки.

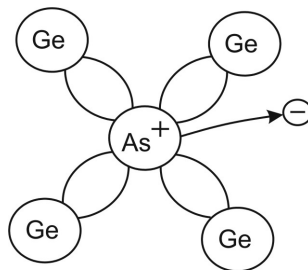


Рис. 6.5

В окрестности атома As возникает положительный заряд, но он связан с этим атомом и не может перемещаться по решетке. Таким образом, в полупроводниках с примесью, валентность которой на единицу больше валентности основных атомов, имеется только один вид носителей тока – электроны. Атомы примеси, поставляющие электроны, называются донорами, сам полупроводник обладает электронной проводимостью и называется полупроводник *n*-типа (negative). Донорные узлы заряжены положительно и действуют как ловушка для электронов. Но т.к. энергия связи лишнего электрона с атомом примеси очень мала, то связь захваченного электрона непрочная и легко разрушается за счет тепловых колебаний решетки.

Наличие атома примеси искажает поле решетки, а это приводит к появлению примесного уровня, расположенного в запрещенной зоне (рис. 6.6). В полупроводниках *n*-типа это донорный уровень. Для пары Ge–As  $\Delta E \approx 0,05$  эВ (напомним:  $\Delta E_{\text{щели}} \approx 0,72$  эВ). Уровень Ферми располагается в верхней половине

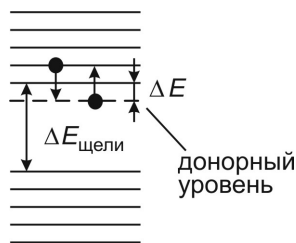


Рис. 6.6

запрещенной зоны. Наличие дополнительного энергетического уровня, расположенного несколько ниже «дна» зоны проводимости, подробно обсуждалось в разделе «Рассеяние и захват электронов на нерегулярностях решетки».

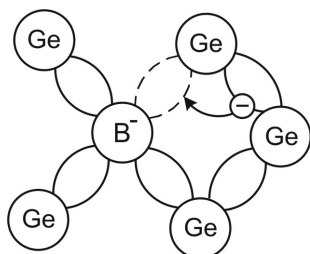


Рис. 6.7

Пусть теперь валентность примеси на единицу меньше валентности основных атомов, например, в германий внедрили бор с валентностью три (рис. 6.7).

Если попытаться представить себе это образно, получится следующая картина.

Трех валентных электронов бора недостаточно для образования устойчивых связей со всеми четырьмя соседями

Ge. Тогда атом бора, пытаясь выдать себя за объект с валентностью четыре, должен утащить нужный ему электрон, например, у соседнего атома Ge и окажется отрицательно заряженным ионом. Но там, где он стащит электрон, останется дырка. Избыточный отрицательный заряд возле атома примеси будет связан и не может перемещаться по кристаллу.

Таким образом, в полупроводниках с примесью, валентность которой на единицу меньше валентности основных атомов, возникают носители тока только одного вида – дырки. Атомы примеси, которые способны образовать дырку, являются акцепторами, проводимость называется дырочной, а сам полупроводник – полупроводником *p*-типа (*positive*).

Наличие акцепторных примесей приводит к появлению в запрещенной зоне акцепторных уровней (рис. 6.8). Для пары Ge-B:

$\Delta E \approx 0,08$  эВ. Уровень Ферми располагается в нижней половине запрещенной зоны. Появление дополнительного акцепторного уровня неизбежно вытекает из анализа энергетического спектра электронов при их захвате на нерегулярностях решетки (см. «Рассеяние и захват электронов на нерегулярностях решетки»). Раньше мы не знали, что делать со знаком «плюс» в выра-

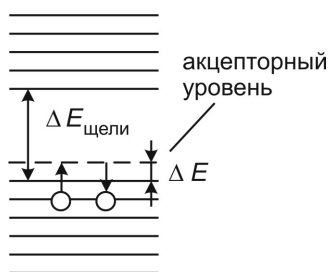


Рис. 6.8

жении (5.18) для энергии электрона при наличии атома примеси. Сейчас становится понятным, что это соответствует дополнительному акцепторному уровню, расположенному несколько выше потолка валентной зоны. Так как для нас теперь дырки являются реальными частицами с положительным зарядом, то это приводит к смене знака коэффициента  $A$  в уравнениях (5.16) и (5.17) (данный коэффициент зависит от энергии взаимодействия дырки и атомов решетки). В этом случае автоматически появляется возможность дополнительного энергетического уровня, расположенного в запрещенной зоне несколько выше потолка разрешенной зоны.

При повышении температуры уровень Ферми в полупроводниках  $p$ - и  $n$ -типа смещается к середине запрещенной зоны.

Вклад различных механизмов проводимости (собственной и примесной) определяется концентрацией примесей и сильно зависит от температуры.

Например, в чистом Ge собственная концентрация электронов и дырок при  $T \sim 293$  К составляет величину порядка  $n_p, n_n \sim 2,5 \cdot 10^{13} \text{ 1/см}^3$ . Число атомов Ge  $\sim 4,5 \cdot 10^{22} \text{ 1/см}^3$ . Если есть примесь, которая полностью «ионизирована», то при наличии одного атома примеси на  $10^6$  атомов Ge получаем концентрацию дополнительных электронов:

$$n_{\text{электр}} \sim 4,5 \cdot 10^{22} \cdot 10^{-6} \sim 4,5 \cdot 10^{16} \text{ 1/см}^3$$

(сравните с собственной концентрацией электронов и дырок). Таким образом, при низких температурах преобладает примесная проводимость.

При повышении температуры концентрация примесных носителей тока быстро достигает насыщения (т.е. освобождаются все донорные и заполняются все акцепторные уровни), и с ростом температуры все в большей степени начинает сказываться собственная проводимость за счет переброса электронов в зону проводимости. При температуре порядка  $300^\circ\text{C}$  собственная проводимость становится уже преобладающей.

### 6.3. РАБОТА ВЫХОДА.

#### КОНТАКТНАЯ РАЗНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛОВ

Электроны проводимости не могут покидать металл в заметном количестве. Если электрон покинет металл, то это приводит к возникновению в данном месте избыточного положительного заряда. Кроме того, уже вылетевшие электроны также отталкивают других желающих вылететь. Таким образом, на границе металл – воздух формируется двойной электрический слой, появляется электрическое поле и, как следствие, разность потенциалов. Потенциальная энергия электронов  $E_p$  внутри металла меньше, чем снаружи. Т.е. металл представляет собой для электронов потенциальную яму глубиной  $E_{p0}$  с практически вертикальными стенками (рис. 6.9). Так как заряд электрона отрицателен, то потенциал внутри металла больше, чем потенциал в непосредственной близости к поверхности, на величину  $E_{p0}/e$  (рис. 6.10).

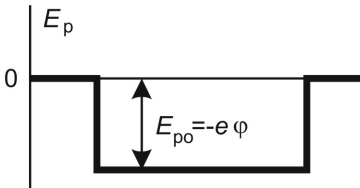


Рис. 6.9

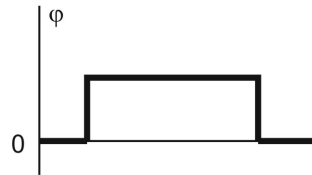


Рис. 6.10

Сообщение металлу избыточного положительного заряда увеличивает потенциал как на поверхности металла, так и внутри. Потенциальная же энергия электрона, соответственно, уменьшается (рис. 6.11). Сообщение отрицательного заряда металлу увеличивает потенциальную энергию (рис. 6.12).

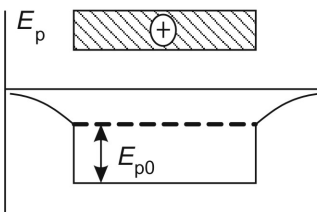


Рис. 6.11

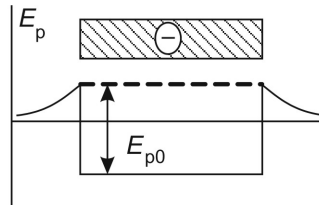


Рис. 6.12



Для удаления электрона из металла требуется совершить работу выхода. Если бы все электроны имели одинаковую энергию на дне потенциальной ямы, то работа выхода равнялась  $E_{p0}$ . На самом деле даже при абсолютном нуле температуры значения энергии электрона заключены в интервале от нуля до  $E_F$  (напомним, что  $E_F$  – это уровень Ферми). Поэтому под работой выхода понимают наименьшую энергию, которую необходимо сообщить электрону для удаления его из металла.

$$A_{\text{вых}} = E_{p0} - E_F = e\phi.$$

Это же определение распространяют на любые температуры. Так как уровень Ферми слегка зависит от температуры, как и глубина потенциальной ямы, то работа выхода также является функцией температуры. Работа выхода в значительной степени определяется состоянием поверхности и ее покрытием (например, нанесение на поверхность вольфрама слоя окисла щелочноземельных материалов понижает работу выхода с 4,5 эВ до 1,5–2 эВ).

Приведем теперь в контакт два разных металла. Пусть, например, глубина потенциальной ямы в первом металле меньше, чем во втором (рис. 6.13). При возникновении контакта между металлами электроны станут переходить с самых высоких уровней первого металла на более низкие свободные уровни второго металла. В результате потенциал первого металла возрастет, а второго – уменьшится. Соответственно, потенциальная энергия в первом металле уменьшится, а во втором увеличится (рис. 6.14).

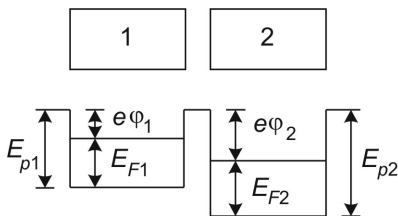


Рис. 6.13

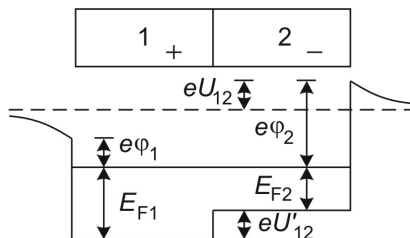


Рис. 6.14

Условием равновесия между металлами (а также между полупроводниками, или металлом и полупроводником), как можно

доказать, является выравнивание уровней Ферми. В этом случае потенциальная энергия электрона в непосредственной близости к поверхности первого металла будет меньше, чем вблизи второго металла, на величину  $e\phi_2 - e\phi_1$ . Отношение этой величины к заряду электрона называется контактной разностью потенциалов (точнее, внешней контактной разностью потенциалов):

$$U_{12} = (e\phi_2 - e\phi_1) / e .$$

Она устанавливается между точками, лежащими вне металлов в непосредственной близости к их поверхности. Между внутренними точками металлов имеется внутренняя разность потенциалов:

$$U'_{12} = (E_{F1} - E_{F2}) / e .$$

Чаще же говорят просто о контактной разности потенциалов, подразумевая под ней внешнюю разность потенциалов.

#### 6.4. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

Рассмотрим теперь замкнутую цепь из двух разнородных металлов (рис. 6.15). Сумма скачков потенциалов вдоль всей этой цепи, очевидно, должна быть равной нулю. Поэтому ни о какой электродвижущей силе не может быть и речи (а как хотелось бы!). Но если спаи  $A$  и  $B$  имеют разную температуру, то в такой цепи возникает термоЭДС (явление Зеебека, 1821 г.). Она обусловлена тремя причинами: зависимостью уровня Ферми от температуры, диффузией электронов (или дырок) вследствие разной плотности электронного газа и увлечением электронов фононами. При наличии градиента температуры вдоль проводника возникает дрейф

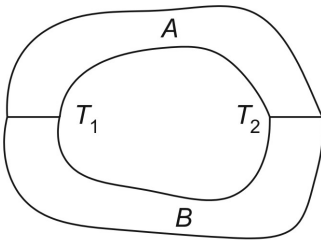


Рис. 6.15

фононов. Сталкиваясь с электронами, фононы сообщают им упорядоченное движение от более нагретого конца к менее нагретому. Опыт показывает, что термоЭДС пропорциональна разности температур спаев:  $\varepsilon = \alpha(T_A - T_B)$ , где  $\alpha$  называется удельная термоЭДС (порядка  $10^{-5} \div 10^{-4}$  В/К). Для полупроводников  $\alpha$  значительно

больше (в полупроводниках имеются носители тока разного знака – электроны и дырки) и слабо зависит от температуры.

Явление Зеебека используется для создания термопар, измеряющих температуру (точность измерения – порядка  $0,01\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Термопары из полупроводниковых материалов имеют гораздо больший КПД (у металлов  $\approx 0,5\%$ , для полупроводников  $\approx 10\%$ ). Полупроводниковые термопары можно использовать даже в качестве небольших генераторов.

Кроме того, существует и обратное явление, открытое Пельтье в 1834 г. При протекании тока через цепь, составленную из разнородных металлов или полупроводников, в одних спаях происходит выделение тепла, а в других – поглощение тепла. Т.е., попросту говоря, одни спаи нагреваются, другие – охлаждаются. Количество тепла пропорционально прошедшему через спай заряду. При перемене направления тока тепло изменяет знак, т.е. там, где тепло выделялось, происходит его поглощение, и наоборот.

В случае контакта двух веществ с одинаковым типом носителей тока (металл – металл, металл – полупроводник  $n$ -типа, два полупроводника  $p$ - или  $n$ -типа) носители тока (электроны или дырки) по разные стороны от спая имеют разную энергию. Когда они попадают в область с меньшей энергией, то они отдают избыток энергии кристаллической решетке, в результате спай нагревается. На другом спае носители заимствуют недостающую энергию у решетки, что приводит к охлаждению спая.

В случае контакта двух полупроводников с различным типом проводимости на одном спае электроны, двигаясь навстречу друг другу, рекомбинируют, и при этом высвобождается энергия; на другом спае происходит обратный процесс – рождение пар электрон – дырка. На образование пары электрон – дырка затрачивается энергия, которая заимствуется у решетки, спай охлаждается.

## 6.5. КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Рассмотрим теперь более подробно, что произойдет, если привести в контакт два полупроводника, обладающих разным типом проводимости. Например, соединить два образца Ge с различными примесями  $p$ - и  $n$ -типа (рис. 6.16, а). Практически очень сложно добиться идеального механического контакта между ними

на атомном уровне. Поэтому поступают следующим образом. После того, как из расплава будет выращена одна половинка кристалла, добавляют подходящую присадку и выращивают другую половинку. Либо наносят на кристалл немного примеси и затем подогревают кристалл, чтобы часть атомов примеси продиффундировала внутрь. В любом случае образуется так называемый  $p$ - $n$  переход, ширина которого составляет порядка  $10^{-4}$  см.

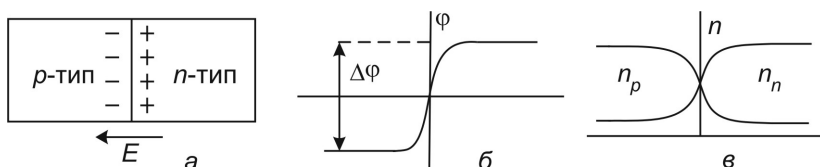


Рис. 6.16

В  $n$ -области имеются свободные электроны, в  $p$ -области – свободные дырки. До соединения средний заряд в каждом полупроводнике равен нулю.

После того как материалы соединятся, электроны смогут перейти из материала  $n$ -типа в материал  $p$ -типа, а дырки переходят из материала  $p$ -типа в материал  $n$ -типа. В области контакта появляется электрическое поле, которое рождает разность потенциалов  $\Delta\phi$  (рис. 6.16, б).

В условиях равновесия полный ток диффузии через контакт равен нулю. Кроме появления  $\Delta\phi$ , изменяется и концентрация положительных и отрицательных носителей тока в материале  $p$ - и  $n$ -типа (рис. 6.16, в).

Найдем теперь концентрацию электронов и дырок в  $p$ - и  $n$ -областях (это необходимо для анализа работы  $p$ - $n$  перехода). Отношение количества носителей того и другого типа в обеих областях можно определить из распределения Больцмана ( $n \sim \exp[-E/kT]$ ):

$$\frac{n_p(n\text{-область})}{n_p(p\text{-область})} = \exp\left(-\frac{q_p \Delta\phi}{kT}\right),$$

где  $q_p$  – заряд дырки,  $q_p \Delta\phi$  – энергия, которая требуется, чтобы перенести заряд  $q_p$  через  $\Delta\phi$ . Точно так же получаем и для носителей  $n$ -типа:

$$\frac{n_n(n\text{-область})}{n_n(p\text{-область})} = \exp\left(-\frac{q_n \Delta\phi}{kT}\right).$$

При этом  $q_n = -q_p$ . Из этих уравнений следует, что любое из них дает нам разность потенциалов  $\Delta\phi$  по значениям концентрации электронов и дырок. Кроме того,  $n_n n_p \approx \text{const}$  (для  $p$ - и  $n$ -областей).

Это мы уже видели ранее (см. главу 6.1: данное произведение зависит только от температуры и ширины запрещенной зоны кристалла).

Если образовать замкнутую цепь, то, казалось бы, по этой цепи пойдет ток. Но этого не происходит, т.к. скачки потенциала будут иметь разный знак. А если  $p$ - $n$  переход облучить светом? При поглощении фотона образуется в области  $p$ - $n$  перехода пара электрон – дырка. В сильном электрическом поле  $p$ - $n$  перехода дырка втянется в  $p$ -область, а электрон – в  $n$ -область, и вот теперь эти добавочные заряды уже могут вызвать электрический ток! При этом энергия поглощенных фотонов света переходит в энергию электрического тока. Это явление получило название вентильного фотоэффекта (на этом принципе работают солнечные батареи).

## 6.6. ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЙ ДИОД. УРАВНЕНИЕ ШОКЛИ

При соединении двух полупроводников с разным типом проводимости в  $p$ - и  $n$ -областях появляются носители заряда обоих типов: основные и неосновные (рис. 6.17). Начинается диффузия основных носителей заряда из одной области в другую (дырки из  $p$ -области, где их много, проникают в  $n$ -область, а электроны из  $n$ -области в  $p$ -область). После установления равновесия в области контакта появляется электрическое поле  $E_k$  и контактная разность потенциалов  $\Delta\phi$ . Появляется запирающий слой, препятствующий дальнейшей диффузии. Включим теперь батарею (рис. 6.18). При под-

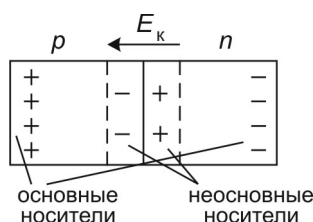


Рис. 6.17

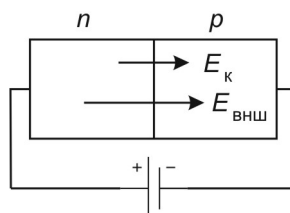


Рис. 6.18

ключении положительного полюса к  $n$ -области, а отрицательного – к  $p$ -области внешнее электрическое поле накладывается на контактное. При этом электроны оттягиваются к положительному полюсу, а дырки – к отрицательному, растет толщина запирающего слоя и высота потенциального барьера. В такой цепи электрического тока не будет (вернее, будет, но очень маленький, обусловленный неосновными носителями заряда).

При подключении положительного полюса к  $p$ -области, а отрицательного – к  $n$ -области (рис. 6.19) внешнее электрическое поле будет направлено против контактного, и электроны начинают поджиматься к  $p$ - $n$  переходу (как и дырки). Толщина запирающего слоя резко падает (т.к. снижается высота потенциального барьера) и по такой цепи начинает течь электрический ток. На этом принципе основана работа полупроводникового диода.

Попытаемся рассчитать величину тока, проходящего через  $p$ - $n$  переход при включении батареи. В материале  $p$ -типа имеется высокая концентрация положительных носителей тока. Когда они

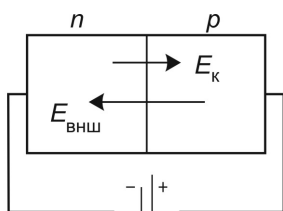


Рис. 6.19

приближаются к  $p$ - $n$  переходу (рис. 6.20), то только малая часть из них может взять потенциальный барьер (пусть их ток равен  $J_1$ ). Когда батарея не включена, то высота потенциального барьера равна  $q\Delta\phi$ . С другой стороны (из  $n$ -области) также двигаются дырки (неосновные носители) к  $p$ - $n$  переходу. Этот ток  $J_0$  пропорционален плотности дырок в  $n$ -области. Эти дырки свободно проходят  $p$ - $n$  переход, но их очень мало. В условиях равновесия токи дырок справа и слева должны быть равны:

$$J_0(n \rightarrow p) = J_1(p \rightarrow n)$$

Ток  $J_0$  пропорционален концентрации дырок в  $n$ -области. По распределению Больцмана,

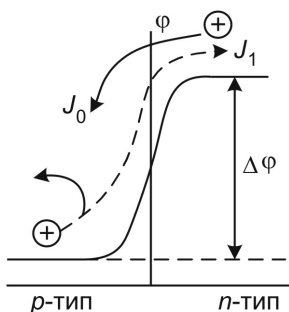


Рис. 6.20

$$n_p(n\text{-область}) \sim n_p(p\text{-область}) \exp(-q\Delta\phi/kT)_p.$$

Таким образом получаем, что ток дырок из  $p$ -области в  $n$ -область будет пропорционален

$$J_1 \sim n_p(p\text{-область}) \exp(-q\Delta\phi/kT).$$

Помним, что при равновесии этот ток равен  $J_0$ . Включим теперь внешнее электрическое поле (т.е. подсоединим батарею с напряжением  $U$ ). При этом высота потенциального барьера понижается на величину  $U$ . Теперь ток дырок из  $p$ -области в  $n$ -область усилится, т.к. барьер стал ниже:

$$J_1 \sim n_p(p\text{-область}) \exp(-q(\Delta\phi - U)/kT).$$

Легко видеть, что этот ток можно выразить через  $J_0$ :

$$J_1(p \rightarrow n) = J_0 \exp(qU/kT).$$

Т.е. ток дырок из  $p$ -области в  $n$ -область растет по экспоненте, а ток дырок из  $n$ -области в  $p$ -область остается постоянным (все дырки скатываются с потенциальной горки, пока  $U < \Delta\phi$ ). Полный ток дырок через  $p$ - $n$  переход равен

$$J = J_1 - J_0 = J_0 [\exp(qU/kT) - 1].$$

Здесь ток  $J_0$  обусловлен плотностью неосновных положительных носителей в  $n$ -области перехода. Это уравнение называется уравнением Шокли.

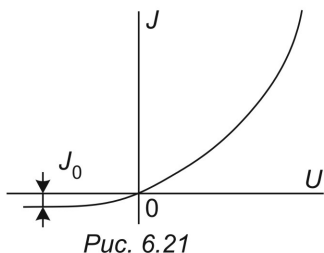
Конечно, все будет точно так же и по отношению к отрицательным носителям заряда, только теперь под  $J_0$  нужно понимать ток, обусловленный неосновными отрицательными носителями заряда в  $p$ -области.

Полный ток через  $p$ - $n$  переход равен

$$J = J_0 [\exp(qU/kT) - 1],$$

где  $J_0$  – максимальный ток, который течет через  $p$ - $n$  переход при обратном включении батареи (обратный ток). Обычно уравнение Шокли записывают следующим образом:

$$J = J_0 [\exp(\beta qU/kT) - 1].$$



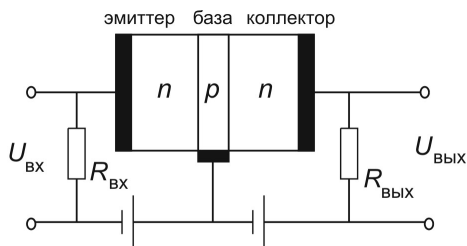
Здесь  $\beta$  – некоторая константа, если она равна единице, то выпрямитель называется идеальным. На рис. 6.21 представлена вольт-амперная характеристика полупроводникового диода.

## 6.7. ТРАНЗИСТОР

Пожалуй, самой важной областью применения полупроводников является транзистор. Состоит он из двух полупроводниковых переходов, расположенных вплотную друг к другу. Его работа частично основана на тех же принципах, которые мы только что описывали, говоря о полупроводниковом диоде.

В зависимости от порядка, в котором чередуются области с разным типом проводимости, различают  $n-p-n$  и  $p-n-p$  транзисторы. Средняя часть транзистора называется базой. Прилегающие к базе с обеих сторон области с другим типом проводимости образуют эмиттер и коллектор.

На рис. 6.22 показана схема включения транзистора типа  $n-p-n$ . На переход эмиттер–база подается постоянное смещающее напряжение  $U_3$  в прямом направлении, а на переход база–коллектор – постоянное напряжение  $U_k$  в обратном направлении. Усиливаемое переменное напряжение  $U_{вх}$  подается через небольшое входное сопротивление  $R_{вх}$  на переход эмиттер–база. Усиленное напряжение  $U_{вых}$  снимается с выходного сопротивления  $R_{вых}$ . При выбран-



ных знаках постоянных напряжений сопротивление перехода эмиттер–база невелико, сопротивление же перехода база–коллектор, напротив, очень велико. Это позволяет взять сопротивление  $R_{вых}$  достаточно большим.



На рис. 6.23, *а* представлено распределение потенциальной энергии электронов (сплошная линия) и дырок (пунктирная) в случае отсутствия любых внешних напряжений (картина, естественно, симметричная). Подключение прямого напряжения  $U_3$  понижает потенциальный барьер на первом переходе, а подключение обратного напряжения  $U_k$ , наоборот, повышает потенциальный барьер на втором

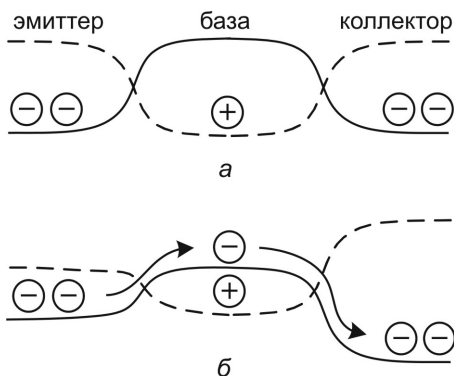


Рис. 6.23

переходе (рис. 6.23, *б*). Протекание тока в цепи эмиттера сопровождается проникновением электронов в область базы. Проникшие в область базы электроны диффундируют в направлении коллектора. При небольшой толщине базы почти все электроны, не успевая рекомбинировать, «скатываются» с потенциальной горки на границе база–коллектор, и поступают в цепь коллектора.

Изменение входного напряжения  $U_{вх}$  приводит к изменению тока в цепи эмиттера  $J_3$ , что изменяет количество электронов, проникающих в коллектор и, соответственно, изменяет ток в цепи коллектора. При небольшой рекомбинации электронов  $J_k \approx J_3$ . Откуда в силу закона Ома следует:

$$\frac{U_{вых}}{U_{вх}} \approx \frac{R_{вых}}{R_{вх}}.$$

И поскольку  $R_{вых} \gg R_{вх}$ , напряжение на выходе значительно превосходит входное напряжение. Таким образом, транзистор усиливает как напряжение, так и мощность за счет источника тока, включенного в цепь коллектора.

Принцип работы транзистора типа  $p-n-p$  аналогичен рассмотренному выше принципу работы транзистора типа  $n-p-n$ . Отличие лишь в том, что роль электронов теперь играют дырки.

В настоящее время полупроводниковые приборы нашли самое широкое применение как в технике, так и в науке, однако их рассмотрение выходит за рамки нашего курса.

### **ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ «ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ»**

6.1. Определив концентрации свободных электронов и дырок в чистом беспримесном полупроводнике, показать, что при достаточно низких температурах уровень Ферми находится посередине запрещенной зоны.

6.2. Концентрация свободных электронов в полупроводнике  $n$ -типа при достаточно низких температурах равна:

$$n_n = \sqrt{2n_0} (mkT / 2\pi\hbar^2)^{3/4} \exp(-\Delta E / 2kT),$$

где  $n_0$  – концентрация донорных атомов,  $\Delta E$  – ширина запрещенной зоны. Требуется:

а) получить это выражение с помощью формулы (4.1);

б) найти положение уровня Ферми.

6.3. Красная граница фотопроводимости чистого беспримесного германия при низких температурах соответствует длине волны  $\lambda_0 \approx 1,7$  мкм. Найти температурный коэффициент сопротивления

$\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$  германия при температуре  $T = 300$  К.

6.4. Найти минимальную энергию, необходимую для образования пары электрон – дырка в чистом теллуре при температуре 0 К, если известно, что его проводимость возрастает в  $\eta = 5,2$  раза при увеличении температуры от  $T_1 = 300$  К до  $T_2 = 400$  К.

6.5. Удельное сопротивление чистого беспримесного германия при комнатной температуре  $\rho_0 = 50$  Ом·см. После включения источника света оно стало равным  $\rho_1 = 40$  Ом·см, а через  $\tau = 8,0$  мс после выключения источника света стало равным  $\rho_2 = 45$  Ом·см. Найти среднее время жизни электронов и дырок.

6.6. Во сколько раз возрастет электропроводность кремния при нагревании от 0 до 10 °С? (Ширина запрещенной зоны для кремния равна 1,1 эВ.)

### **ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ**

#### **«КОНТАКТНЫЕ И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ»**

6.7. Доказать, что при контакте двух различных металлов их уровни Ферми находятся на одной высоте.

6.8. Доказать, что число термоэлектронов, вылетающих еже-секундно с единицы поверхности металла со скоростями в интер-вале  $\vartheta, \vartheta + d\vartheta$ , равно

$$dN(\vartheta) = 2\pi(m/2\pi\hbar)^3 \exp[-(A + E)/kT] \vartheta^3 d\vartheta,$$

где  $E$  – кинетическая энергия термоэлектрона,  $A$  – работа выхода с поверхности металла. Иметь в виду, что  $A \gg kT$ .

6.9. Найти с помощью формулы из задачи 6.8 среднюю кинетическую энергию термоэлектронов и плотность тока термоэмиссии с поверхности металла.

## 7. МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ КВАНТОВЫХ ЗАКОНОВ

### 7.1. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Обычно волновая функция, которая появляется в уравнении Шредингера, относится к одной или двум частицам. И сама волновая функция «классическим смыслом» не обладает в отличие, например, от электрического поля или других подобных величин. Конечно, волновая функция отдельной частицы – это «поле» в том смысле, что она является функцией точки пространства, но «классического» значения она не имеет. И тем не менее, в некоторых случаях квантово-механическая волновая функция действительно имеет классическое значение, и тогда особенности квантовой механики начинают проявляться крупномасштабно.

При достаточно низких температурах, когда энергия системы очень мала, вместо прежнего громадного количества состояний остается небольшое число состояний, которые расположены вблизи основного. Именно в этих условиях квантово-механический характер основного состояния может проявиться на макроскопическом уровне. И тогда квантовая механика вызывает свои собственные, характерные только для нее эффекты в крупных масштабах.

Самым известным эффектом, проявляющимся при низких температурах, является сверхпроводимость. Это явление тесно связано с магнитным полем. Внешнее магнитное поле описывается векторным потенциалом  $\vec{A}$ , определяемым соотношением:  $\vec{B} = \text{rot} \vec{A}$  ( $\vec{B}$  – индукция магнитного поля). Если векторный потенциал отсутствует, то уравнение Шредингера для частицы с зарядом  $q$  и массой  $m$  имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi + U \psi ,$$

где  $\frac{\hbar}{i} \nabla$  – оператор импульса,  $U = q\phi$  – потенциальная энергия частицы в электрическом поле с потенциалом  $\phi$ .

Влияние магнитного поля на движение заряженной частицы можно учесть, если заменить оператор импульса  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$  на выражение  $\hat{p} - q\vec{A}$ . К этому выводу можно прийти следующим образом. Предположим, что заряженная частица движется в свободной от магнитного поля области со скоростью  $\mathfrak{S}_1$ . В момент времени  $t = 0$  включается магнитное поле, и при его изменении индуцируется электрическое поле, удовлетворяющее условию:

$$\text{rot}\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}.$$

С учетом векторного потенциала  $\vec{A}$  получаем:

$$\text{rot}\vec{E} = -\text{rot}\left(\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right).$$

После интегрирования по пространственным координатам получаем (без учета постоянной интегрирования):

$$\vec{E} = -\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}.$$

Тогда импульс частицы в момент времени  $t$  будет равен:

$$m\vec{\mathfrak{S}}_2 = m\vec{\mathfrak{S}}_1 + \int_0^t q\vec{E}dt = m\vec{\mathfrak{S}}_1 - q\int_0^t \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}dt = m\vec{\mathfrak{S}}_1 - q\vec{A}.$$

Таким образом,  $m\vec{\mathfrak{S}}_2 + q\vec{A} = m\vec{\mathfrak{S}}_1$ . Следовательно, вектор  $m\vec{\mathfrak{S}} + q\vec{A}$  не изменяется в присутствии магнитного поля, и его можно рассматривать как некоторый эффективный импульс. В то же время кинетическая энергия  $E$  зависит только от  $m\vec{\mathfrak{S}}$ , и если до приложения магнитного поля  $E = f(m\vec{\mathfrak{S}})$ , то и в магнитном поле должно быть

$$E = f(\vec{p} - q\vec{A}).$$

Для того, чтобы перейти на язык квантовой механики, необходимо заменить оператор импульса  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$  на оператор  $\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A}$ .

Таким образом, уравнение Шредингера для частицы с зарядом  $q$  в электромагнитном поле с потенциалами  $\vec{A}, \phi$  будет иметь вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \psi + q\phi \psi. \quad (7.1)$$

## 7.2. МАКРОСКОПИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Важную сторону уравнения Шредингера для отдельной частицы составляет идея о том, что вероятность обнаружить частицу в каком-либо месте определяется квадратом модуля волновой функции. Когда вероятность обнаружить электрон в каком-то месте убывает, то вероятность обнаружить его в другом месте возрастает (так что полная вероятность не изменяется). В этом смысле можно говорить о некотором потоке вероятности. Для установления его вида продифференцируем по времени квадрат модуля волновой функции:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (7.2)$$

Волновые функции  $\psi$  и  $\psi^*$  подчиняются уравнению Шредингера:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hat{H} \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \hat{H}^* \psi^*, \end{aligned} \quad (7.3)$$

причем  $\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z)$  (пусть пока магнитное поле отсутствует). Подставляя в (7.2) значения  $\frac{\partial \psi}{\partial t}$  и  $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$  из (7.3) и используя тождество

$$\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi = \text{div}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi),$$

нетрудно получить уравнение, аналогичное классическому уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}, \quad (7.4)$$

где  $\vec{j}$  обозначает вектор:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi),$$

который может быть назван вектором «плотности потока вероятности». При наличии магнитного поля, в соответствии с ранее сказанным, следует заменить оператор  $\frac{\hbar}{i} \nabla$  на  $\frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A}$ . И тогда выражение для вектора плотности потока вероятности приобретет вид:

$$\vec{j} = \frac{1}{2m} \left[ \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\vec{A} \right) \psi - \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + q\vec{A} \right) \psi^* \right]. \quad (7.5)$$

Соотношение (7.4) является, по сути, законом сохранения для вероятности и означает, что вероятность сохраняется локально. Если частица исчезает из одной области, то она не может оказаться в другой без того, чтобы что-то не протекло в промежутке между этими областями.

Когда Шредингер написал свое знаменитое уравнение, он также понял, что закон сохранения (7.4) есть следствие этого уравнения. При этом он ошибочно предположил, что  $|\psi|^2$  — это плотность электрического заряда, а  $\vec{j}$  — плотность электрического тока. И только несколько позднее Борн отождествил  $\psi$  в уравнении Шредингера с амплитудой вероятности, предположив, что квадрат амплитуды — это не плотность заряда, а только вероятность обнаружить электрон в данном месте. Таким образом, волновая функция  $\psi(x, y, z)$  не описывает размазанный электрон с плавно меняющейся плотностью заряда. Электрон может быть либо здесь, либо где-то еще, но он всегда представляет собой точечный заряд.

В то же время можно представить ситуацию, когда в одном и том же состоянии находится огромное число частиц с одной

и той же волновой функцией. В этом случае вероятность обнаружить любую из частиц в данном месте пространства пропорциональна  $|\psi|^2$ . Но так как частиц очень много, то произведение  $|\psi|^2 dV$  будет пропорциональным числу частиц в объеме  $dV$  и тогда  $|\psi|^2$  можно отождествить с плотностью частиц. Если же все частицы обладают и одинаковым зарядом  $q$ , то можно пойти дальше и отождествить  $|\psi|^2$  с плотностью заряда. Чтобы получить размерность плотности заряда, нужно умножить  $|\psi|^2$  на заряд  $q$ . Конечно, можно включить этот постоянный множитель в саму волновую функцию и принять за плотность заряда само произведение  $\psi\psi^*$ . В этом случае вектор  $\vec{j}$ , определяемый соотношением (7.5), на самом деле можно считать плотностью электрического тока.

Итак, когда в одном и том же состоянии одновременно находится большое число заряженных частиц, возможно иное толкование волновых функций. Плотность заряда и электрический ток могут быть получены прямо из волновых функций, и тогда сами волновые функции приобретают непосредственный физический смысл, который распространяется на «классические» макроскопические ситуации.

Нечто подобное происходит и с нейтральными частицами, например, с фотонами. Для них существует уравнение, аналогичное уравнению Шредингера – это уравнение Максвелла для электромагнитного поля. Физика квантов света совпадает с классической физикой, потому что фотоны являются невзаимодействующими бозе-частицами, которые во множестве могут находиться в одном состоянии.

Трудность же с электронами состоит в том, что нельзя поместить в одно и то же состояние больше одного электрона. Поэтому очень долгое время считалось, что волновая функция для электрона, входящая в уравнение Шредингера, никогда не будет иметь макроскопического представления, подобного макроскопическому представлению для фотонов. И только открытие явления сверхпроводимости предоставило физикам именно такой случай.



### 7.3. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Ранее уже обсуждалось явление сверхпроводимости, когда при достаточно низких температурах некоторые металлы полностью теряют сопротивление протеканию электрического тока. Данное явление наблюдается из-за того, что при взаимодействии электронов с ионами решетки возникает слабое эффективное притяжение между электронами и в итоге они образуют связанные пары (куперовские пары). Каждый отдельный электрон является ферми-частицей. Но связанная пара ведет себя как бозе-частица, так как в пары объединяются электроны, обладающие противоположными спинами.

Уравнение Шредингера для пары электронов похоже на (7.1). Единственное отличие состоит в том, что заряд  $q$  равен удвоенному заряду электрона  $q_e$ . При повышении температуры тепловое движение может разрушить куперовские пары. Вероятность такого процесса пропорциональна  $\exp(-E_{\text{пары}}/kT)$ , и тогда не связанные попарно электроны начинают двигаться по кристаллу обычным образом (их называют «квазичастицами» или «нормальными» электронами). Будем рассматривать только случай истинно нулевой температуры и пренебрежем усложнениями, вызываемыми электронами, у которых нет пары («нормальными» электронами).

Ранее уже отмечалось, что вероятность перехода бозонов в состояние, в котором уже находится  $n$  частиц, пропорциональна  $n$ . Так как пары электронов – это бозоны, то когда в одном состоянии собирается множество частиц, амплитуда перехода других пар в то же состояние становится особенно велика. Таким образом, почти все пары должны скопиться при наинизшей энергии в одинаковом состоянии.

Пусть  $\psi$  является волновой функцией пары в наинизшем энергетическом состоянии. Однако из-за того, что произведение  $\psi\psi^*$  пропорционально плотности заряда  $\rho$ , саму волновую функцию можно представить в виде квадратного корня из плотности заряда, умноженного на некоторый фазовый множитель:

$$\psi(r) = \sqrt{\rho(r)} \exp[i\theta(r)], \quad (7.6)$$

где  $\rho(r)$  и  $\theta(r)$  – действительные функции (в таком виде можно, конечно, записать любую комплексную функцию).

Для того чтобы понять смысл фазы волновой функции  $\theta$ , подставим (7.6) в выражение для плотности тока (7.5). Опуская промежуточные выкладки, приведем результат:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \left( \nabla \theta - \frac{q}{\hbar} \vec{A} \right) \rho. \quad (7.7)$$

Так как и плотность тока  $\vec{j}$ , и плотность заряда  $\rho$  имеют для сверхпроводящего электронного газа прямой физический смысл, то соотношение (7.7) говорит о том, что и фаза  $\theta$  – вполне реальная, наблюдаемая вещь, это часть плотности тока! При этом само значение фазы может быть определено с точностью до некоторой константы.

#### 7.4. КВАНТОВАНИЕ МАГНИТНОГО ПОТОКА

Рассмотрим теперь взаимодействие сверхпроводника с внешним магнитным полем. Если взять металлический образец в уже сверхпроводящем состоянии и поместить его в не очень сильное магнитное поле, то это поле не сможет проникнуть в металл. Связано это с проявлением закона электромагнитной индукции, согласно которому переменное магнитное поле, пытаясь проникнуть в проводник, неизбежно рождает электрическое поле. И даже самое малое электрическое поле при нулевом сопротивлении, в силу правила Ленца, вызовет достаточный электрический ток, который вытолкнет магнитное поле за пределы металла.

Поменяем теперь последовательность действий. Поместим обычный проводник в магнитное поле, а затем охладим металл ниже критического уровня (когда металл становится сверхпроводником). В этом случае магнитное поле будет вытолкнуто из металла – это эффект Мейснера. Очевидно, что в сверхпроводнике должен возникнуть свой собственный ток, и именно такой величины, чтобы вытолкнуть магнитное поле наружу. Причем этот ток затухает по мере удаления от поверхности

образца по экспоненциальному закону  $\exp(-\lambda x)$  с некоторой эффективной глубиной проникновения  $1/\lambda \approx 2 \cdot 10^{-6}$  см. И если сверхпроводник является сплошным, то в его глубине не будет ни магнитного поля, ни токов.

Возьмем теперь проводящее кольцо, толщина которого велика по сравнению с  $1/\lambda$ . Наложим сначала на это кольцо магнитное поле, затем охладим до сверхпроводящего состояния и только потом уберем источник магнитного поля. На рис. 7.1 отражена последовательность всех действий. Если бы кольцо было «классическим» объектом с идеальной (бесконечной) проводимостью, то, скорее всего, внутри кольца должен был остаться весь магнитный поток, который был до охлаждения, независимо от его величины. Но квантово-механическая теория сверхпроводимости утверждает, что оставшийся магнитный поток должен быть кратным постоянной Планка  $\hbar$ ! Докажем это.

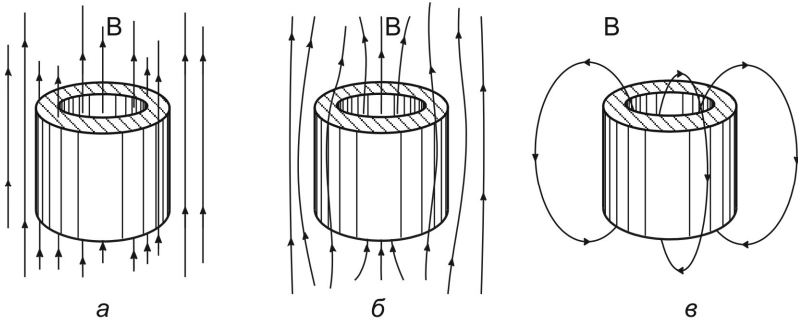


Рис. 7.1

Далеко в глубине кольца плотность тока равна нулю, а это, в силу соотношения (7.7), означает, что

$$\hbar \nabla \theta = q \vec{A}. \quad (7.8)$$

Проинтегрируем данное соотношение по любому контуру  $L$ , который проходит внутри кольца и нигде не подходит близко к поверхности:

$$\hbar \oint_L \nabla \theta d\vec{l} = q \oint_L \vec{A} d\vec{l}.$$

В силу теоремы Стокса правую часть этого равенства можно представить в таком виде:

$$\oint_L \vec{A} d\vec{l} = \int_S \text{rot} \vec{A} d\vec{s},$$

где поверхность  $S$  опирается на контур  $L$ , и часть ее проходит в пустом пространстве внутри кольца. В силу определения векторного потенциала ( $\vec{B} = \text{rot} \vec{A}$ ) получаем:

$$\oint_L \nabla \theta d\vec{l} = \frac{q}{\hbar} \int_S \vec{B} d\vec{s} = \frac{q}{\hbar} \Phi, \quad (7.9)$$

где  $\Phi$  – магнитный поток, «захваченный» сверхпроводящим кольцом.

Левую часть соотношения (7.9) можно представить в виде изменения фазы волновой функции при совершении  $n$  оборотов вокруг кольца. А так как единственное физическое требование, которое можно предъявить к фазе волновой функции  $\psi(r) = \sqrt{\rho(r)} \exp[i\theta(r)]$ , сводится к тому, что в каждой точке волновая функция должна принимать только одно значение, то экспоненциальный множитель в волновой функции не изменится, если к фазе  $\theta$  добавить  $2\pi n$  ( $n$  – любое целое число). Таким образом, левую часть соотношения (7.9) можно записать в виде:

$$\oint_L \nabla \theta d\vec{l} = 2\pi n.$$

И тогда магнитный поток будет равен

$$\Phi = \frac{2\pi n \hbar}{q}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

т.е. захваченный магнитный поток всегда обязан быть кратным величине  $2\pi\hbar/q$ . Эта величина получила название кванта магнитного потока (флюксон).

Согласно теории сверхпроводимости, величина заряда  $q$  должна быть равна удвоенному заряду электрона  $q_e$ , и тогда фундаментальная единица магнитного потока  $\Phi_0$  должна быть равна:

$$\Phi_0 = \frac{\pi\hbar}{q_e} \approx 2,07 \cdot 10^{-15} \text{ Вб}. \quad (7.10)$$

Все это поразительно похоже на рассматривавшееся нами ранее квантование магнитного момента. Но теперь мы наблюдаем случай, когда квантовая механика вызывает свои собственные, характерные для нее эффекты в макроскопических масштабах.

Квантование магнитного потока связано с квантованием сверхпроводящего тока, текущего по кольцу. Ток может принимать только такие значения, при которых по длине кольца может уложиться целое число длин волн волновой функции сверхпроводящих электронов. А это типично интерференционный эффект.

Сверхпроводящее токовое состояние отличается от токового состояния в несверхпроводящем металле своей устойчивостью к рассеянию носителей тока на разного рода дефектах. Благодаря этому становится возможным существование незатухающих токов в сверхпроводниках, содержащих примеси посторонних элементов или другого рода дефекты. Наличие примесей не препятствует установлению макроскопической когерентности сверхпроводящего состояния. Данная ситуация касается систем, которые в среднем являются однородными. Но такое же свойство сохраняется и для систем, не являющихся однородными даже в среднем, например, при наличии достаточно тонкой пленки диэлектрика между двумя сверхпроводниками.

Макроскопическая когерентность сверхпроводящего состояния связана с тем, что сверхпроводник характеризуется единой для всего объема волновой функцией  $\psi(r) = \sqrt{\rho(r)} \exp[i\theta(r)]$ , определяющей поведение не одной частицы, а всего «коллектива» электронов. Наличие единой для всего образца  $\psi$ -функции влечет за собой возникновение фиксированных (в данный момент времени) разностей фаз в любых двух точках сверхпроводника. Такая «когерентность фазы» приводит к ряду специфических макроскопических квантовых эффектов, которые мы сейчас и рассмотрим.

## 7.5. ПЕРЕХОДЫ ДЖОЗЕФСОНА

Рассмотрим два одинаковых сверхпроводника, разделенных тонким слоем диэлектрика (рис. 7.2). В этом случае при достаточно малой толщине изолятора ( $<10^{-7}$  см) возможно туннелирование куперовских пар через данный переход. Такой процесс

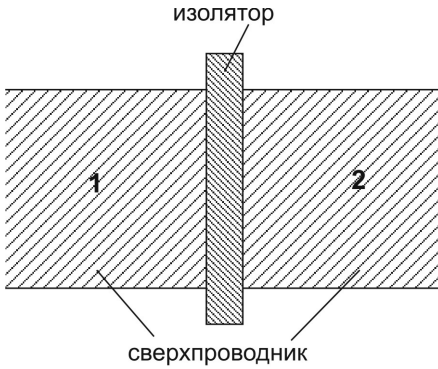


Рис. 7.2

называется эффектом Джозефсона, теоретически предсказавшим его, или «слабой» сверхпроводимостью. Данный процесс представляет собой прекрасную иллюстрацию концепции макроскопической когерентности сверхпроводящего состояния.

Будем рассматривать такую систему сверхпроводящих электронов как двухуровневую квантовую систему [3].

Пусть  $C_1$  – амплитуда общей волновой функции всех электронов с одной стороны перехода, а  $C_2$  – соответствующая амплитуда волновой функции с другой стороны. При отсутствии магнитного поля такая двухуровневая система будет описываться системой уравнений (1.10):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} &= H_{11}C_1 + H_{12}C_2 \\ i\hbar \frac{\partial C_2}{\partial t} &= H_{22}C_2 + H_{21}C_1. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Матричные элементы  $H_{11}$  и  $H_{22}$  являются энергией системы в областях 1 и 2, а  $H_{12}$  и  $H_{21}$  характеризуют вероятность туннелирования электронов в соседние области. Очевидно, можно положить  $H_{12} = H_{21} = A$  (не путать с векторным потенциалом!).

Подсоединим области 1 и 2 к двум полюсам источника тока с разностью потенциалов  $V$ . Тогда энергию  $H_{11}$  можно считать равной  $qV/2$ , а энергию  $H_{22}$  равной  $-qV/2$ . В этом случае систему уравнений (7.11) можно представить в таком виде:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} &= \frac{qV}{2}C_1 + AC_2 \\ i\hbar \frac{\partial C_2}{\partial t} &= -\frac{qV}{2}C_2 + AC_1. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Это стандартные уравнения двух связанных квантово-механических состояний. Для их решения сделаем подстановки:

$$C_1 = \sqrt{\rho_1} \exp(i\theta_1), \quad C_2 = \sqrt{\rho_2} \exp(i\theta_2), \quad (7.13)$$

где  $\theta_1$  и  $\theta_2$  – фазы по обе стороны контакта, а  $\rho_1$  и  $\rho_2$  – плотности электронов в сверхпроводниках. После подстановки (7.13) в (7.12) и дифференцирования получаем:

$$\begin{aligned} i\hbar(\dot{\rho}_1 + i\rho_1\dot{\theta}_1) &= \frac{qV}{2}\rho_1 + A\sqrt{\rho_1\rho_2} \exp(i\delta) \\ i\hbar(\dot{\rho}_2 + i\rho_2\dot{\theta}_2) &= -\frac{qV}{2}\rho_2 + A\sqrt{\rho_1\rho_2} \exp(-i\delta), \end{aligned} \quad (7.14)$$

где  $\delta = \theta_2 - \theta_1$ , а знак «точка» над символом, как обычно, означает дифференцирование по времени.

Приравнявая вещественные части к вещественным, а мнимые части – к мнимым, приходим к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_1 &= \frac{2}{\hbar} A\sqrt{\rho_1\rho_2} \sin \delta \\ \dot{\rho}_2 &= -\frac{2}{\hbar} A\sqrt{\rho_1\rho_2} \sin \delta \\ \dot{\theta}_1 &= -\frac{qV}{2\hbar} - \frac{A}{\hbar} \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}} \cos \delta \\ \dot{\theta}_2 &= \frac{qV}{2\hbar} - \frac{A}{\hbar} \sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_2}} \cos \delta. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Первая пара уравнений (7.15) говорит о том, как менялись бы плотности заряда в соседних областях, если бы не было источника тока (убыль одной сопровождалась бы ростом другой). В этом случае плотность тока через переход равнялась бы  $\dot{\rho}_1$  (или  $-\dot{\rho}_2$ ), и для нее можно записать:

$$j = \frac{2A}{\hbar} \sqrt{\rho_1\rho_2} \sin \delta.$$

Конечно, уход электронов из одной области будет тотчас же компенсирован приходом электронов из источника тока, поскольку

переход включен в замкнутую цепь. Тогда концентрация электронов в обеих областях будет примерно одинаковой и постоянной. Полагая  $\rho_1 = \rho_2 = \rho_0$ , получаем выражение для сверхпроводящего тока:

$$j = j_c \sin \delta, \quad (7.16)$$

где  $j_c = 2A\rho_0/\hbar$  – некоторая постоянная величина, которая, подобно величине  $A$ , характеризует данный переход.

Выражение (7.16) связывает протекающий в системе ток с величиной разности фаз на переходе. В действительности же в эксперименте задается ток, а соотношение (7.16) служит для того, чтобы определить необходимую для этого разность фаз  $\delta = \theta_2 - \theta_1$ . В этом смысле соотношение (7.16) означает лишь то, что абсолютная величина сверхпроводящего тока не может превысить некоторого максимального значения, равного  $j_c$ . Эту величину называют критическим током Джозефсона.

Вторая пара уравнений (7.15) дает:

$$\dot{\delta} = (\dot{\theta}_2 - \dot{\theta}_1) = \frac{qV}{\hbar}. \quad (7.17)$$

Из этого соотношения сразу следует:

$$\delta(t) = \delta(0) + \frac{q}{\hbar} \int V(t) dt, \quad (7.18)$$

где  $\delta(0)$  представляет собой значение разности фаз при  $t = 0$ , кроме того, заряд  $q$  равен удвоенному заряду электрона. В уравнениях (7.16) и (7.17) содержится общая теория переходов Джозефсона.

Пусть приложенное к переходу напряжение постоянно и равно  $V_0$ . В этом случае

$$\delta(t) = \delta(0) + \frac{qV_0}{\hbar} t.$$

Так как отношение  $q/\hbar$  достаточно велико, то синус в выражении (7.16) будет меняться очень быстро, и в итоге никакой ток через переход не пойдет. Правда, так как температура не совсем равна нулю, небольшой ток все же будет из-за проводимости



«нормальных» электронов (он еще называется квазичастичным током). С другой стороны, если напряжение на переходе равно нулю, то ток уже не будет равным нулю! Это свойство называют **стационарным эффектом Джозефсона**. Данное явление непосредственно определяется такой фундаментальной квантово-механической характеристикой, как фаза волновой функции. Стационарный эффект Джозефсона впервые наблюдали в своей работе Андерсон и Роуэлл в 1963 г. Впервые в истории физики был поставлен эксперимент, в котором такое макроскопическое явление, как электрический ток, непосредственно определялось фазой волновой функции.

Иногда эффект Джозефсона называют туннелированием куперовских пар. Такое определение отражает тот факт, что сверхпроводящий туннельный ток Джозефсона, как и обычный сверхпроводящий ток, переносится куперовскими парами. В то же время, как показывает точная теория, величина тока Джозефсона пропорциональна вероятности туннелирования (коэффициенту прозрачности  $D$ ) не для пары, а для отдельного электрона. Это связано с тем, что туннелирование в эффекте Джозефсона представляет собой сложный процесс, проходящий фазу промежуточного состояния, в котором пары диссоциированы.

Ток через переход можно получить и другим способом. Наложим на постоянное напряжение высокочастотный сигнал:  $V(t) = V_0 + v \cos \omega t$ .

Тогда из (7.18) следует:

$$\delta(t) = \delta(0) + \frac{qV_0}{\hbar}t + \frac{qv}{\hbar\omega} \sin \omega t.$$

Полагая  $v \ll V_0$ , нетрудно получить

$$j = j_c \left[ \sin \left( \delta(0) + \frac{qV_0}{\hbar}t \right) + \frac{qv}{\hbar\omega} \sin \omega t \cos \left( \delta(0) + \frac{qV_0}{\hbar}t \right) \right].$$

Первое слагаемое после усреднения по времени даст нуль, но второе слагаемое не будет равно нулю, если

$$\hbar\omega = qV_0, \quad (7.19)$$

т.е. при выполнении условия (7.19) через переход пойдет ток! В каком-то смысле мы наблюдаем резонансный эффект.

Обратимся теперь к вольтамперным характеристикам тока Джозефсона. При  $T = 0$  через туннельный переход может протекать либо постоянный сверхпроводящий ток, величина которого не превышает некоторого критического значения  $j_c$ , либо переменный сверхпроводящий ток, описываемый при постоянном напряжении  $V_0$  выражением:

$$j = j_c \sin \left( \frac{qV_0}{\hbar} t + \delta(0) \right).$$

При этом его среднее по времени значение равно нулю. При температурах, отличных от нуля, ситуация изменяется, так как наряду со сверхпроводящим током через переход может протекать и «нормальный», туннельный ток. В связи с этим в системе возникают потери.

## 7.6. ДЖОЗЕФСОНОВСКАЯ ГЕНЕРАЦИЯ

Посмотрим теперь, что же происходит с джозефсоновским переходом, если по нему пропускать заданный извне постоянный ток, больший критического ( $j > j_c$ ). Так как сверхпроводящий ток не может быть больше  $j_c$ , то возникнет ток «нормальных» электронов. В этом случае существенную роль начнут играть процессы затухания, связанные с диссипацией энергии переменного тока Джозефсона. Феноменологически затухание можно учесть с помощью введения «нормального» тока, или тока квазичастиц [9]. Тогда полный ток через переход можно записать в виде:

$$j = j_c \sin \delta + \frac{V}{R_T}, \quad (7.20)$$

где  $V$  – напряжение на переходе,  $R_T$  – величина сопротивления для квазичастичного тока на единицу площади контакта, являющаяся существенной функцией температуры и обращающаяся в бесконечность при  $T \rightarrow 0$ . Соотношение (7.20) представляет собой так называемую резистивную модель перехода Джозефсона. Переход рассматривается как параллельно включенные собственно джозефсоновский переход и «нормальный» участок.

С учетом соотношения (7.17) полный ток будет равен

$$j = j_c \sin \delta + \frac{\hbar}{qR_T} \dot{\delta}. \quad (7.21)$$

Уравнение (7.21) дает функциональную зависимость тока от напряжения, приложенного к переходу. В реальной ситуации это напряжение само должно изменяться под действием тока. В качестве первого приближения будем полагать значение тока не зависящим от времени (исследование полной замкнутой системы уравнений электродинамики слабой сверхпроводимости приведено в работе [9]). Интегрируя уравнение (7.21) при данном допущении, получаем выражение для разности фаз  $\delta = \theta_2 - \theta_1$ :

$$\delta = 2 \arctg \left[ \frac{j_c + \sqrt{j^2 - j_c^2} \operatorname{tg} \left( qR_T \sqrt{j^2 - j_c^2} t / 2\hbar \right)}{j} \right]. \quad (7.22)$$

После подстановки выражения (7.22) во второе уравнение Джозефсона (7.17) получаем напряжение на переходе в виде:

$$V(t) = \frac{(j^2 - j_c^2) R_T}{j + j_c \cos(\omega t - \beta)}, \quad (7.23)$$

где  $\beta = \arctg(j_c / \sqrt{j^2 - j_c^2})$ ,

$$\omega = \sqrt{j^2 - j_c^2} qR_T / \hbar. \quad (7.24)$$

В уравнении (7.23) содержится удивительное свойство джозефсоновского перехода. Если заданный извне постоянный ток больше критического тока перехода, то на переходе возникает напряжение, периодически зависящее от времени. Это явление получило название джозефсоновской генерации (которая впервые наблюдалась И.К. Янсоном, В.М. Свистуновым и И.М. Дмитренко в 1964 г.), или нестационарного эффекта Джозефсона.

Усредняя по времени уравнение (7.23), получаем:

$$q \langle V \rangle = \hbar \omega. \quad (7.25)$$

Соотношение (7.25) может быть истолковано следующим образом. При отличной от нуля разности потенциалов  $V$  мы

должны считать, что куперовские пары в металлах 1 и 2 «конденсированы» каждая на своем уровне энергии. Переходы между этими уровнями происходят с изменением энергии на величину  $\Delta E = qV$ , и тогда  $\omega = \Delta E / \hbar$  есть классическая частота перехода. Эти переходы, при наличии взаимодействия с полем излучения, должны сопровождаться испусканием реальных фотонов с частотой  $\omega$ . Тогда соотношение (7.25) выражает собой просто закон сохранения энергии.

Возможен также обратный переход, связанный с поглощением фотона и переходом пары на более высокий уровень. В силу фазовой когерентности макроскопических состояний электронов, излучение должно быть не только монохроматическим, но и когерентным. Таким образом, Джозефсон по существу, предсказал возможность создания квантового генератора электромагнитного излучения нового типа, использующего макроскопические квантовые свойства сверхпроводников. Косвенным доказательством существования электромагнитного излучения, генерируемого джозефсоновским током, явились эксперименты, в которых применялись туннельные контакты, диэлектрические зазоры которых плавно соединялись друг с другом. Один из туннельных контактов играл роль генератора, а другой выполнял функции детектора.

## 7.7. СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ КВАНТОВЫЕ ИНТЕРФЕРОМЕТРЫ

Рассмотрим очень эффектный и интересный опыт по интерференции сверхпроводящих токов, проходящих через два параллельных перехода Джозефсона.

Интерференция связана с различием в фазах, с которыми сливаются токи, проходящие по двум разным путям, что является полной аналогией интерференции когерентных световых волн от двух источников (рис. 7.3). Полный ток  $j_{\text{полн}}$  является суммой токов через каждый переход. Пусть  $j_a$  и  $j_b$  — это токи через пере-

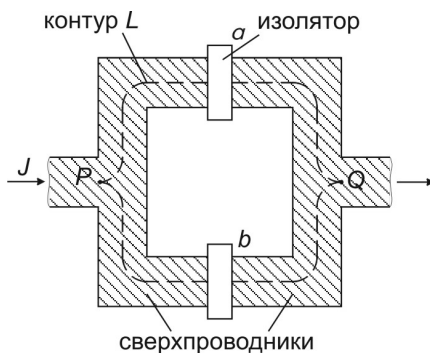


Рис. 7.3

ходы, а их фазы равны, соответственно,  $\theta_a$  и  $\theta_b$ . Вспомним соотношение (7.8), связывающее градиент фазы с векторным потенциалом:  $\hbar \nabla \theta = 2q_e \vec{A}$ . Интегрируя это соотношение по верхнему пути через переход  $a$ , получаем:

$$\Delta\theta_{P \rightarrow Q} = \theta_a + \frac{2q_e}{\hbar} \int_{\text{верх}} \vec{A} d\vec{l}. \quad (7.26)$$

Аналогично можно записать разность фаз и по нижнему пути через переход  $b$ :

$$\Delta\theta_{P \rightarrow Q} = \theta_b + \frac{2q_e}{\hbar} \int_{\text{нижн}} \vec{A} d\vec{l}. \quad (7.27)$$

Так как разность фаз волновых функций в точках  $P$  и  $Q$  не должна зависеть от пути движения токов, то из (7.26) и (7.27) получаем:

$$\theta_b - \theta_a = \frac{2q_e}{\hbar} \oint_L \vec{A} d\vec{l}.$$

Здесь интеграл берется по замкнутому контуру  $L$ , проходящему через оба перехода, и, как уже отмечалось ранее, он равен магнитному потоку, проходящему через контур  $L$ .

Таким образом, разность фаз токов  $\delta$  можно выразить через магнитный поток  $\Phi$ :

$$\delta = \theta_b - \theta_a = \frac{2q_e}{\hbar} \Phi.$$

Последнее соотношение означает, что сами фазы  $\theta_b$  и  $\theta_a$  можно представить в виде

$$\theta_a = \theta_0 + \frac{q_e}{\hbar} \Phi, \quad \theta_b = \theta_0 - \frac{q_e}{\hbar} \Phi,$$

где значение  $\theta_0$  определяется характеристиками переходов и может зависеть, в частности, от прилагаемого к переходам внешнего напряжения. Так как полный ток  $j_{\text{полн}}$  равен сумме отдельных токов, то, в силу соотношения (7.16), его можно записать так:

$$j_{\text{полн}} = j_c \left[ \sin \left( \theta_0 + \frac{q_e}{\hbar} \Phi \right) + \sin \left( \theta_0 - \frac{q_e}{\hbar} \Phi \right) \right] =$$

$$= 2j_c \sin \theta_0 \cos \frac{q_e}{\hbar} \Phi, \quad (7.28)$$

где  $j_c$  – значение критического тока Джозефсона.

Мы не знаем, каково значение  $\theta_0$ , но, независимо от его величины, максимальный ток для любого магнитного потока не может превысить значения

$$j_{\text{max}} = 2j_c \left| \cos \frac{q_e}{\hbar} \Phi \right|. \quad (7.29)$$

Этот предельный ток зависит, в первую очередь, от магнитного потока и достигает максимума при

$$\Phi = \frac{\pi \hbar}{q_e} n = n \Phi_0,$$

где  $n$  – целое число,  $\Phi_0$  – квант магнитного потока. Т.е. ток достигает максимума всякий раз, когда связанный с контуром магнитный поток принимает значения, кратные кванту магнитного потока.

Подобные устройства получили название сверхпроводящих квантовых интерферометров – сквидов (аббревиатура английского словосочетания Superconducting Quantum Interference Device). Их можно использовать как приборы необычайно высокой чувствительности во всех случаях, при которых изменение наблюдаемой величины можно преобразовать в изменение магнитного потока. Ограничение чувствительности, определяемое лишь тепловыми шумами джозефсоновских переходов, составляет, по теоретическим оценкам, порядка  $10^{-5} \Phi_0$ , если время измерения составляет не менее 1 с. Эти простые по конструкции сверхпроводящие устройства открыли совершенно новые горизонты в области измерительной техники. С их помощью, например, можно создавать магнитометры с чувствительностью порядка  $10^{-15}$  Тл (для сравнения – магнитное поле Земли – около 50 мкТл), вольтметры с чувствительностью порядка  $10^{-15}$  В и другие приборы.

## 7.8. ПРИМЕНЕНИЕ СЛАБОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Мы уже знаем, что если через джозефсоновский переход пропускать ток, больший критического, то напряжение на переходе будет иметь переменную составляющую с частотой  $\omega = 2q_e V / \hbar$ . Если же данный переход поместить во внешнее высокочастотное поле, то при совпадении частоты этого поля с частотой джозефсоновской генерации должен проявиться резонанс. В этом случае вольтамперная характеристика для усредненных значений тока и напряжения будет иметь вид ступенчатой кривой (рис. 7.4). Расстояние между ступеньками в точности равно  $\hbar\omega/2q_e$ . Поскольку измерение частоты может быть произведено с очень высокой точностью, то и расстояние между ступеньками напряжения на вольтамперной характеристике также может быть точно определено. Таким образом, появляется возможность создать стандарт «нормального» элемента, ЭДС которого может изменяться от нескольких микровольт до милливольта и определяться с точностью, на много порядков превышающей другие известные методы.

Использование сквида в качестве нуль-прибора в обычной мостиковой схеме позволяет создать вольтметр с чувствительностью порядка  $10^{-15}$  В.

Существенно нелинейные свойства джозефсоновских туннельных контактов делают возможным их использование в СВЧ-технике в качестве маломощных генераторов, усилителей, стандартов частоты, смесителей, преобразователей частоты и генераторов гармоник.

Время переключения джозефсоновского туннельного контакта из сверхпроводящего состояния в нормальное лежит в субнаносекундной области. А это делает перспективным их применение в качестве переключающих элементов и элементов памяти.

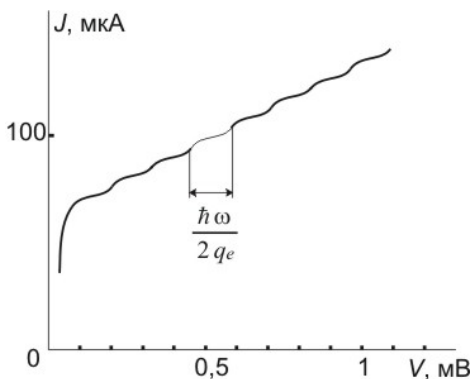


Рис. 7.4

Если вблизи джозефсоновского перехода с осциллирующим током поместить исследуемое вещество, то спектр поглощения излучения, присущий данному веществу, скажется на вольтамперной характеристике контакта. Таким образом, оказывается возможной спектроскопия твердых тел в широком диапазоне частот.

Кроме того, как уже отмечалось ранее, сквиды можно использовать для измерения очень слабых магнитных полей в самых различных областях науки и техники. Сквиды уже применяются в биологии и медицине, потому что дают более точные данные, чем электрокардио- или энцефалографы, и превосходят даже рентгеновские и ЯМР-томографы.

Наметившийся в последние годы прогресс в области высокотемпературной сверхпроводимости делает чрезвычайно перспективным практическое применение джозефсоновских контактов в самых различных областях.

### **ЗАДАЧИ К РАЗДЕЛУ «ЭФФЕКТ ДЖОЗЕФСОНА»**

7.1. Два джозефсоновских перехода с критическими токами  $J_{c1} = 500$  мкА и  $J_{c2} = 700$  мкА включены параллельно в сверхпроводящую цепь. Полный ток через оба перехода равен 1 мА. Чему равны токи в каждом переходе?

7.2. Найти амплитуду переменного напряжения на джозефсоновском переходе, через который протекает ток, больший критического.

7.3. Критический ток джозефсоновского перехода равен  $J_c = 100$  мкА. Через переход пропускается постоянный ток  $J_0 = 70$  мкА и слабый переменный ток с амплитудой  $J_1 = 2$  мкА и частотой  $\nu = 10$  МГц. Найти напряжение на переходе.

7.4. Получить выражение для плотности тока (7.7).



## ОТВЕТЫ К ЗАДАЧАМ

### Волны де Бройля.

#### СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

- 1.1.  $\lambda = \pi\hbar\sqrt{2(\eta^2 - 1)/m\Delta E} = 0,15 \text{ нм.}$
- 1.2.  $\lambda = 2\pi\hbar\sqrt{3mkT} = 0,145 \text{ нм.}$
- 1.3. Увеличится в  $\sqrt{E/(E - U_0)} = 2$  раза.
- 1.4.  $E = 2e^2(B\rho)^2/m = 0,12 \text{ МэВ.}$
- 1.5.  $\Delta E = 2\pi^2\hbar^2/m\lambda^2 - p^2/2m = 0,38 \text{ кэВ.}$
- 1.6.  $\lambda' = \lambda\sqrt{(n+1)/(n-1)} = 2,2 \text{ пм.}$
- 1.7.  $\tilde{\lambda} = \lambda_n(1 + m_n/m_{\text{He}}) = 0,07 \text{ нм, где } \lambda_n = 2\pi\hbar/\sqrt{2m_nE}.$
- 1.8.  $\tilde{\lambda} = \lambda(1 + \eta)/(1 - \eta) = 0,10 \text{ нм, где } \eta = m_{\text{H}}/m_{\text{He}}.$
- 1.9.  $\tilde{\lambda} = 2\lambda_1\lambda_2/\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2}.$
- 1.10. а)  $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} \frac{1}{\sqrt{1 + E/2mc^2}},$  б)  $E < 10 \text{ кэВ.}$
- 1.11.  $E = (\sqrt{2} - 1)mc^2 = 0,21 \text{ МэВ.}$
- 1.12.  $E > mc^2(\sqrt{1 + (\lambda_c/l)^2} - 1) = 0,6 \text{ ГэВ, где } \lambda_c = 2\pi\hbar/mc$  –  
комптоновская длина волны протона.
- 1.13.  $\lambda = \lambda_k / \sqrt{1 + mc\lambda_k/\pi\hbar} = 3,3 \text{ пм.}$
- 1.14.  $\varphi(\lambda) \sim \lambda^{-4} \exp(-a/\lambda^2), a = 2\pi^2\hbar^2/mkT,$   
 $\lambda_{\text{вер}} = \sqrt{a/2} = \pi\hbar/\sqrt{mkT} = 89 \text{ пм.}$
- 1.15.  $\varphi(\lambda) \sim \lambda^{-5} \exp(-a/\lambda^2), a = 2\pi^2\hbar^2/mkT,$   
 $\lambda_{\text{вер}} = 2\pi\hbar/\sqrt{5mkT} = 57 \text{ пм.}$
- 1.16.  $\vartheta = 4\pi\hbar l/bm\Delta x = 1,0 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$

$$1.17. E = 2(\pi\hbar l / d\Delta x)^2 / m = 24 \text{ эВ.}$$

$$1.18. U_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2med^2 (\sqrt{\eta} - 1)^2 \sin^2 \theta = 0,15 \text{ кВ.}$$

$$1.19. d = \pi\hbar k / \sqrt{2mE} \cos(\alpha/2) = 0,21 \text{ нм, } k = 4.$$

$$1.20. d = \pi\hbar k / \sqrt{2mE} \sin \vartheta = 0,23 \text{ нм, где угол } \vartheta \text{ находится из условия } \operatorname{tg} 2\vartheta = r/l.$$

$$1.21 \text{ а) } n_2 / n_1 = \sqrt{1 - eU/E} = 0,70; \text{ б) } U_{\text{кр}} = (E/e) \cos^2 \alpha = 75 \text{ В.}$$

$$1.23. n = \sqrt{1 + U_i/U} = 1,05.$$

$$1.24. \beta = \arcsin(\sin \alpha / \sqrt{1 + eU_i/E}) = 52^\circ$$

$$1.25. U_i = (\pi\hbar k)^2 / 2med^2 - U \sin^2 \theta = 15 \text{ В.}$$

$$1.26. E_n = (n\pi\hbar)^2 / 2ml^2, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$1.27. 2\pi r = n\lambda, \text{ где } n = 1, 2, 3 \dots; \quad \lambda = 2\pi r_0 n, \quad r_0 - \text{первый борровский радиус.}$$

$$1.28. w = \vartheta/2 + \text{const}/\vartheta, \text{ частота } \nu \text{ находится из условия } 2\pi\hbar\nu = m\vartheta^2/2 + \text{const}.$$

Воспользуемся формулой Рэлея, связывающей групповую и фазовую скорости  $u = w - \lambda dw/d\lambda$ . Полагая здесь  $\lambda = 2\pi\hbar/m\vartheta$  и  $u = \vartheta$ , получаем

$$\vartheta = w + \vartheta \frac{dw}{d\vartheta} = \frac{d}{d\vartheta}(w\vartheta),$$

откуда

$$w\vartheta = \frac{\vartheta^2}{2} + \text{const} \rightarrow w = \frac{\vartheta}{2} + \text{const}/\vartheta.$$

Далее воспользуемся связью длины волны и частоты:

$$\nu = \frac{w}{\lambda} = \frac{\vartheta/2 + \text{const}/\vartheta}{2\pi\hbar/m\vartheta} = \frac{m\vartheta^2/2 + \text{const}}{2\pi\hbar}.$$

Во всех явлениях произвольные постоянные, входящие в выражения для  $\nu$  и  $w$ , не играют никакой роли, и их можно положить равными нулю.

$$1.29. \text{Полагая } \Delta x = b/2, \text{ получаем } \alpha \approx \lambda/\pi b \approx 2^\circ.$$

$$1.30. \Delta \vartheta \approx 1 \cdot 10^6 \text{ м/с}; \vartheta_1 = 2,2 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

$$1.31. \Delta x \approx \hbar t / m \Delta x_0 \approx 1 \cdot 10^3 \text{ км}.$$

$$1.32. E_{\min} \approx 2\hbar^2 / ml^2 = 15 \text{ эВ}. \text{ Здесь } \Delta x = l/2, p \approx \Delta p.$$

$$1.33. \Delta \vartheta / \vartheta \approx 2\hbar / \sqrt{2ml^2 E} = 1,2 \cdot 10^{-4}. \text{ Здесь } \Delta x = l/2.$$

$$1.34. E \approx 8 \cdot 10^4 \hbar^2 / ml^2. \text{ Здесь } \Delta x = l/2.$$

$$1.35. \Delta x \approx \hbar l / \sqrt{2md^2 eU} = 8 \text{ нм}.$$

$$1.36. \Delta x \approx c\tau = 3 \text{ м}, \Delta \lambda / \lambda \approx \lambda / 2\pi c\tau \approx 3 \cdot 10^{-8}.$$

1.37. При сжатии ямы на величину  $\delta l$  необходимо совершить работу  $\delta A = F \delta l$ , которая пойдет на приращение энергии частицы  $\delta E$ . Отсюда находим  $F = \frac{dE}{dl} \approx \frac{4\hbar^2}{ml^3} = \frac{2E_{\min}}{l}$ . Здесь принято  $\Delta x \approx l/2, p \approx \Delta p$ .

1.38. Полагая  $\Delta x \approx x$ ,  $\Delta \vartheta \approx \vartheta$  и минимизируя выражение для полной энергии осциллятора, получаем  $E_{\min} \approx \hbar \omega$ .

1.39. Полагая для обоих электронов  $\Delta r \approx r$ ,  $\Delta \vartheta \approx \vartheta$ , запишем выражение для полной энергии двух электронов:

$W \approx 2(p^2 / 2m - 2e^2 / 4\pi\epsilon_0 r) + e^2 / 8\pi\epsilon_0 r \approx \hbar^2 / mr^2 - 7e^2 / 8\pi\epsilon_0 r$ . Минимум энергии соответствует  $r \approx 16\pi\epsilon_0 \hbar^2 / 7me^2 \approx 0,3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . Для минимальной энергии получаем:

$$E_{\min} \approx -(7/4)^2 me^4 / 16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 = -83 \text{ эВ} \text{ (эксперимент дает } -79 \text{ эВ)}.$$

$$1.40. \Delta x / \lambda \approx 1 / (\pi \Delta E / E) = 2 \cdot 10^3.$$

1.41. Ширина изображения складывается из ширины щели  $b$  и дополнительного уширения  $\Delta'$ , связанного с неопределенностью импульса  $\Delta p$  вдоль щели после ее прохождения. Полагая неопределенность координаты  $\Delta x = b/2$ , получаем:  $\Delta \approx b + 2\hbar l / pb$ , где  $p$  – импульс падающих атомов водорода. Функция  $\Delta(b)$  имеет минимум при  $b \approx \sqrt{2\hbar l / m\vartheta} \approx 10 \text{ мкм}$ .

$$1.42. \Delta \lambda \approx \lambda^2 / c \Delta \tau \approx 10^{-4} \text{ нм}, \Delta \lambda / \lambda \approx \lambda / c \Delta \tau \approx 10^{-7}.$$

$$1.43. d_{\min} \approx 2 \sqrt{\frac{4\pi L \hbar}{\sqrt{2m_p E}}} \approx 8,5 \text{ мкм}.$$

$$1.44. D = d + \frac{4\pi\hbar cl}{derb}.$$

$$1.45. d_{\min} = 2\sqrt{\frac{4\pi\hbar\tau}{m_e}} = 7,6 \text{ мкм.}$$

$$1.46. d_{\min} \approx 2\sqrt{\frac{4\pi\hbar L}{\sqrt{3mkT}}} \approx 7,5 \text{ мкм.}$$

1.47. В данном методе производится измерение энергии частицы до действия силы и после. Измерение начальной энергии  $E_0$ , в силу конечности времени ее измерения  $\tau_1$ , производится с точностью, даваемой соотношением неопределенностей:  $\Delta E \approx \hbar/\tau_1$  (в принципе, при достаточно большом  $\tau_1$  она может быть сделана сколь угодно малой). Так как полное время эксперимента ограничено величиной  $\tau$ , то часть этого времени должна быть затрачена на измерение начальной энергии  $E_0$ , а в оставшуюся часть времени  $(\tau - \tau_1)$  будет происходить изменение энергии под действием силы  $F$ . За время  $\tau - \tau_1$  при условии  $F\tau_1 \ll p_0$  ( $p_0$  – начальный импульс частицы), изменение энергии будет равно:

$$\Delta E_0 = \Delta\left(\frac{p_0^2}{2m}\right) \approx \frac{p_0 \Delta p_0}{m} \approx \frac{p_0}{m} F(\tau - \tau_1),$$

Это изменение энергии можно обнаружить, очевидно, при выполнении условия  $\Delta E_0 > \Delta E = \hbar/\tau_1$ , откуда находим

$$F \geq \frac{\hbar m}{p_0 \tau_1 (\tau - \tau_1)}.$$

Полученное выражение для силы имеет минимум при  $\tau_1 = \tau/2$ .

И, с учетом связи  $E_0 = p_0^2/2m$ , получаем окончательно:

$$F_{\min} = \frac{\hbar}{\tau^2} \sqrt{\frac{8m}{E_0}}.$$

## УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

1.48. Изменится только временной множитель полной волновой функции. А так как физический смысл имеет лишь квадрат модуля волновой функции, то изменение временного множителя никак не проявляется.

1.49. Решение временного уравнения Шредингера при  $U = 0$  в трехмерном пространстве распадается на два множителя, один из которых зависит только от времени, другой – от координат:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right),$$

где  $E$  – полная энергия частицы (в случае стационарных полей остается постоянной). После подстановки этого выражения в исходное уравнение Шредингера и сокращения на  $\exp(-\frac{iEt}{\hbar})$ , получаем уравнение Шредингера для стационарных состояний:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = E \psi.$$

Приведем его к следующему виду:

$$\psi''_x + \psi''_y + \psi''_z + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0.$$

Решение этого уравнения будем искать также методом разделения переменных:  $\psi = X(x)Y(y)Z(z)$ . После подстановки этого выражения в уравнение для  $\psi$  находим:

$$X''/X + Y''/Y + Z''/Z + 2mE/\hbar^2 = 0.$$

Так как полная энергия  $E$  может быть представлена в виде  $E = E_x + E_y + E_z$ , то для функций  $X, Y, Z$  получим уравнения вида:

$$X'' + (2mE_x/\hbar^2)X = 0.$$

Их решения:  $X(x) = A \exp(\pm i k_x x)$ , где  $k_x = \sqrt{2mE_x}/\hbar$ . Аналогично и для  $Y(y), Z(z)$ . В итоге получаем:

$$\psi(x, y, z, t) = A \exp(-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})),$$

где  $\vec{k}$  – волновой вектор,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \sqrt{2mE/\hbar^2} = p/\hbar$ .

1.50. В  $K$ -системе  $\psi(x, t) = A \exp(i(kx - \omega t))$ . С учетом преобразований Галилея

$$x = x' + \vartheta_0 t, \quad \vartheta = \vartheta' + \vartheta_0$$

преобразуем показатель экспоненты:

$$k = m\vartheta / \hbar = k'(1 + \vartheta_0 / \vartheta'), \quad \omega = m\vartheta^2 / 2\hbar = \omega' + (m\vartheta_0 / 2\hbar)(2\vartheta' + \vartheta_0).$$

В результате получим:

$$\psi(x, t) = \psi'(x', t) \exp(i(k_0 x - \omega_0 t)),$$

где  $k_0 = m\vartheta_0 / \hbar$ ,  $\omega_0 = m\vartheta_0^2 / 2\hbar$ . Экспоненциальный множитель описывает движение частицы вместе с  $K'$ -системой относительно  $K$ -системы.

1.51. Проинтегрируем уравнение Шредингера по узкой области шириной  $2\delta$ , внутри которой имеется скачок потенциальной энергии:

$$\psi'_x(+\delta) - \psi'_x(-\delta) = \int_{-\delta}^{\delta} (2m / \hbar^2)(E - U)\psi dx$$

Ввиду конечности разрыва потенциальной энергии интеграл при  $\delta \rightarrow 0$  также стремится к нулю. Отсюда автоматически следует, что волновая функция остается гладкой.

$$1.52. U(x) = 2(\alpha^2 \hbar^2 / m)x^2, \quad E = \alpha \hbar^2 / m.$$

$$1.53. U(x) = -\alpha \hbar^2 / mx, \quad E = -\alpha^2 \hbar^2 / 2m.$$

$$1.54. \langle r \rangle = a / 2.$$

$$1.55. \langle U \rangle = \hbar \sqrt{k / 8m}.$$

1.57. Пусть  $\psi_m$  и  $\psi_n$  — две волновые функции, удовлетворяющие стационарным уравнениям Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_m + U \psi_m = E_m \psi_m$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_n^* + U \psi_n^* = E_n \psi_n^*.$$

Умножим первое из них на  $\psi_n^*$ , а второе – на  $\psi_m$  и вычтем почленно друг из друга. Это дает следующее выражение:

$$\begin{aligned}(E_m - E_n)\psi_m\psi_n^* &= \frac{\hbar^2}{2m}(\psi_m\Delta\psi_n^* - \psi_n^*\Delta\psi_m) = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\operatorname{div}(\psi_m\nabla\psi_n^* - \psi_n^*\nabla\psi_m).\end{aligned}$$

Если теперь проинтегрировать обе стороны этого уравнения по всему пространству, то правая сторона, будучи преобразована по теореме Гаусса, обратится в нуль, и тогда получаем:

$$(E_m - E_n)\int\psi_m\psi_n^*dV = 0.$$

И так как  $E_m \neq E_n$ , отсюда следует искомое соотношение ортогональности

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

## ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

2.1. Выберем решение стационарного уравнения Шредингера в области  $x > 0$  в виде суперпозиции падающей и отраженной волн:

$$\psi(x) = a \exp(ikx) + b \exp(-ikx), \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar.$$

Из условия непрерывности  $\psi(0) = 0$  следует, что  $a = -b$ . Тогда плотность вероятности равна

$$w(x) = \psi\psi^* = 4a^2 \sin^2 kx.$$

Максимумы  $w(x)$  находятся в точках  $x_n = n\pi/2k = \pi\hbar n/\sqrt{8mE}$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

2.2. Возьмем решение уравнения Шредингера в области  $x \leq 0$  в виде

$$\psi_1 = a_1 \exp(ikx) + b_1 \exp(-ikx), \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

и в области  $x > 0$  в виде

$$\psi_2 = a_2 \exp(\beta x) + b_2 \exp(-\beta x), \quad \beta = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar.$$

Из требования конечности волновой функции следует, что  $a_2 = 0$ .

А из условия непрерывности  $\psi$  и  $\psi'$  в точке  $x = 0$  получим:

$$a_1 + b_1 = b_2, \quad a_1 - b_1 = i\beta b_2 / k.$$

Отсюда находим коэффициент отражения

$$R = |b_1 / a_1|^2 = |(k - i\beta) / (k + i\beta)|^2 = 1.$$

При  $E = U_0 / 2 \rightarrow k = \beta$ , и для плотности вероятности получаем:

$w(x \leq 0) = \psi_1 \psi_1^* = 2a_1^2 (1 - \sin 2kx)$ ,  $w(x > 0) = \psi_2 \psi_2^* = 2a_1^2 \exp(-2\beta x)$ , где  $a_1$  представляет собой амплитуду падающей волны (полагаем ее вещественной).

2.3. Решение уравнения Шредингера в области  $x \geq 0$  имеет вид:  $\psi = b \exp(-\beta x)$ , где  $\beta = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar$  (см. предыдущую задачу). Тогда плотность вероятности будет пропорциональна  $\exp(-2\beta x)$ , откуда находим  $x_{\text{эфф}} = 1 / 2\beta$ . Для электрона  $x_{\text{эфф}} = 0,1$  нм.

2.4. Представим решения уравнения Шредингера в виде:

$$\psi_1(x \leq 0) = a_1 \exp(ikx) + b_1 \exp(-ikx), \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar$$

$$\psi_2(x > 0) = a_2 \exp(i\beta x), \quad \beta = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar,$$

где  $a_1$  представляет собой амплитуду падающей волны (полагаем ее вещественной). Из условия непрерывности  $\psi$  и  $\psi'$  в точке  $x = 0$  получим:  $b_1 = a_1(k - \beta) / (k + \beta)$ . Тогда для коэффициентов отражения  $R$  и прозрачности  $D$  находим:

$$R = |b_1 / a_1|^2 = (k - \beta)^2 / (k + \beta)^2, \quad D = 1 - R = 4k\beta / (k + \beta)^2.$$

2.5.  $w_1(x \leq 0) = 16a_1^2 (1 - 3/4 \sin^2 kx) / 9$ ,  $w_2(x > 0) = 16/9 a_1^2$ , где  $a_1$  представляет собой амплитуду падающей волны (полагаем ее вещественной), а  $k = \sqrt{8/3mU_0} / \hbar$ .

2.6. При  $E \ll U_0$   $R \approx 1 - 4\sqrt{E/U_0}$ , при  $E \gg U_0$   $R \approx (U_0/4E)^2$ .

2.7. Представим решения уравнения Шредингера для трех областей в виде:

$$\psi_1(x < 0) = a_1 \exp(ikx) + b_1 \exp(-ikx), \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar$$

$$\psi_2(0 < x < l) = a_2 \exp(i\beta x) + b_2 \exp(-i\beta x), \quad \beta = \sqrt{2m(E + U_0)} / \hbar$$

$$\psi_3(x > l) = a_3 \exp(ikx).$$



Из условия непрерывности  $\psi$  и  $\psi'$  на границах ямы находим:

$$\frac{a_3}{a_1} = \frac{4k\beta \exp(-ikl)}{(k + \beta)^2 \exp(-i\beta l) - (k - \beta)^2 \exp(i\beta l)}.$$

Тогда коэффициент прозрачности будет равен

$$D = \left| \frac{a_3}{a_1} \right|^2 = \left( 1 + \frac{(k^2 - \beta^2)^2}{4k^2\beta^2} \sin^2 \beta l \right)^{-1} = \left( 1 + \frac{U_0 \sin^2 \beta l}{4E(E + U_0)} \right)^{-1}.$$

Для электрона  $D \approx 0,95$ .

2.8. Воспользуемся решением предыдущей задачи. Из условия  $D=1$  следует, что  $\sin(\beta l) = 0$ . Отсюда  $\beta l = n\pi$ , или  $E = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2ml^2 - U_0$ , где  $n$  – целые числа, при которых  $E > 0$ . Соотношение  $\beta l = n\pi$  можно интерпретировать как  $l = n\lambda / 2$ , где  $\lambda$  – дебройлевская длина волны частицы внутри ямы. Для электрона  $E_{\min} = 14$  эВ.

$$2.9. R \approx \frac{\pi \hbar}{2\sqrt{2m(E + U_0)}} \approx 1,7 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

2.10. Максимум отражения будет наблюдаться, очевидно, при минимуме коэффициента прозрачности  $D$ , т.е. при  $|\sin \beta l| = 1$ ,  $\beta = \sqrt{2m(E + U_0)} / \hbar$  (см. решение задачи 2.7). Отсюда легко получить:  $l = (2n + 1)\pi \hbar / \sqrt{8m(E + U_0)} = (2n + 1)\lambda / 4$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ , где  $\lambda$  – дебройлевская длина волны частицы внутри ямы.

2.11. Решение аналогично приведенному в задаче 2.7:

$$D = \left( 1 + \frac{U_0 \sin^2 \beta l}{4E(E - U_0)} \right)^{-1}, \text{ где } \beta = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar.$$

При  $E \rightarrow U_0$  коэффициент прозрачности равен  $D = (1 + ml^2 U_0 / 2\hbar^2)^{-1}$ . Значения энергии  $E$ , при которых частица будет беспрепятственно проходить через такой барьер, равны

$$E = (\pi^2 \hbar^2 / 2ml^2) n^2 + U_0, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

2.12. Представим решения уравнения Шредингера для трех областей в виде:

$$\psi_1(x < 0) = a_1 \exp(ikx) + b_1 \exp(-ikx), \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar$$

$$\psi_2(0 < x < l) = a_2 \exp(\beta x) + b_2 \exp(-\beta x), \quad \beta = \sqrt{2m(-E + U_0)} / \hbar$$

$$\psi_3(x > l) = a_3 \exp(ikx).$$

Из условия непрерывности  $\psi$  и  $\psi'$  на границах ямы находим:

$$\frac{a_3}{a_1} = \frac{4ik\beta \exp(-ikl)}{(k + i\beta)^2 \exp(\beta l) - (k - i\beta)^2 \exp(-\beta l)}.$$

Тогда коэффициент прозрачности будет равен

$$D = \left| \frac{a_3}{a_1} \right|^2 = \left[ 1 + \left( \frac{k^2 + \beta^2}{2k\beta} \right)^2 \sinh^2 \beta l \right]^{-1} = \left( 1 + \frac{U_0^2 \sinh^2 \beta l}{4E(U_0 - E)} \right)^{-1},$$

где  $\sinh \beta l = \frac{\exp(\beta l) - \exp(-\beta l)}{2}$ . При  $\beta l \gg 1$  выражение для  $D$  упрощается:

$$D \approx \frac{16k^2\beta^2}{(k^2 + \beta^2)^2} \exp(-2\beta l) = 16 \frac{E}{U_0} \left( 1 - \frac{E}{U_0} \right) \exp(-2l \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar).$$

Множитель перед экспонентой имеет величину порядка единицы, поэтому можно считать, что

$$D \approx \exp(-2l \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar).$$

2.13. Внутри барьера  $\psi = a \exp(\beta x) + b \exp(-\beta x)$ , где  $\beta = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar$ . Тогда отношение плотностей вероятностей будет равно

$$\frac{w(0)}{w(l)} = \frac{\psi(0)\psi^*(0)}{\psi(l)\psi^*(l)} = \frac{(1 + a/b)(1 + a^*/b^*) \exp(-2\beta l)}{(a/b + \exp(-2\beta l))(a^*/b^* + \exp(-2\beta l))}.$$

Из условия непрерывности  $\psi$  и  $\psi'$  в точке  $x = l$  получаем:

$$\frac{a}{b} = \frac{1+i}{1-i} \exp(-2\beta l). \text{ Подставляя это в предыдущее выражение,}$$

находим

$$w(0)/w(l) = [\exp(2\beta l) + \exp(-2\beta l)]/2.$$

2.14. Очевидно, что для беспрепятственного прохождения через барьер полная энергия частицы  $E$  должна быть больше высоты барьера  $U_0$ . Ширина барьера (ямы) должна удовлетворять условию  $l = \lambda/2, 3\lambda/2, 5\lambda/2, \dots$ , где  $\lambda = 2\pi\hbar/\sqrt{2m(E-U_0)}$  – длина волны де Бройля частицы в области барьера (ямы). Отсюда находим:

$$E = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ml^2},$$

из чего видно, что энергия частицы должна совпадать с одним из собственных значений энергии в бесконечно глубокой яме, дно которой расположено на высоте барьера. Энергия электрона должна быть равна  $E_n = (5 + 37,62n^2)$  эВ.

$$2.15. D \approx \exp\left[-(4l\sqrt{2m/3\hbar}U_0)(U_0 - E)^{3/2}\right].$$

$$2.16. D \approx \exp\left[-(\pi l/\hbar)\sqrt{2m/U_0}(U_0 - E)\right].$$

## ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ЯМЫ

$$2.17. \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{l/2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \text{ для нечетных значений } n = 1, 3, 5, \dots$$

$$\text{и } \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{l/2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) - \text{ для четных значений } n = 2, 4, 6, \dots,$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} n^2 \text{ в обоих случаях.}$$

2.18. Как показано в задаче 2.17, уровни энергии частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме шириной  $l$ , квантованы:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} n^2.$$

При переходе частицы из состояния  $n+1$  в состояние  $n$  излучается квант энергии (фотон) с частотой

$$\omega_{n+1, n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1).$$

Классическая частица колеблется в яме с частотой  $\omega_{\text{кл}} = 2\pi/T$ , где  $T$  – период колебаний, равный  $T = 2l/\vartheta$ ,  $\vartheta$  – скорость частицы при движении от стенки к стенке, определяемая ее энергией. Для сравнения примем значение энергии, равное  $E_n$ . Тогда

$$\vartheta = \sqrt{\frac{2E_n}{m}} = \frac{\pi\hbar n}{ml}.$$

И для частоты излучения  $\omega_{\text{кл}}$  получаем:

$$\omega_{\text{кл}} = \frac{\pi\vartheta}{l} = \frac{\pi^2\hbar n}{ml^2}.$$

Сравним  $\omega_{n+1, n}$  с  $\omega_{\text{кл}}$ :

$$\frac{\omega_{n+1, n}}{\omega_{\text{кл}}} = 1 + \frac{1}{2n} \rightarrow 1 \text{ при } n \rightarrow \infty.$$

Таким образом, «классический» случай получается предельным переходом из квантово-механического решения задачи.

$$2.19. E = (\hbar^2/2m)(\pi a^2/2)^{2/3}.$$

$$2.20. \text{ а) } E = \hbar^2 k^2/2m; \text{ б) } E = \pi^2 \hbar^2 (N-1)^2/2ml^2.$$

$$2.21. \text{ а) } m = 5\pi^2 \hbar^2/2l^2 \Delta E; \text{ б) } n = (\eta+1)/2(\eta-1) = 3.$$

2.22. Из выражения для энергии частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме  $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} n^2$ , следует

$$\frac{dE}{E} = \frac{2dn}{n}. \text{ Отсюда}$$

$$dN = (l/\pi\hbar)\sqrt{m/2E}dE.$$

$$2.23. \text{ а) } F = \pi^2 \hbar^2/ml^3; \text{ б) } A = (\eta^2 - 1)\pi^2 \hbar^2/2ml^2.$$

$$2.24. E_{\min} = \pi^2 \hbar^2 N(N+1)(N+2)/24ml^2;$$

$$F = \pi^2 \hbar^2 N(N+1)(N+2)/12ml^3.$$

$$2.25. w = \frac{2}{l} \int_{l/3}^{2l/3} \sin^2(\pi x/l) dx = 1/3 + \sqrt{3/2\pi} \approx 0,61.$$

$$2.26. l = 2/P_m, E = (\pi\hbar P_m)^2/8m.$$

2.27. Уравнение Шредингера внутри ямы имеет вид:

$$\psi''_x + \psi''_y + k^2\psi = 0, \text{ где } k = \sqrt{2mE} / \hbar.$$

Будем искать его решение в виде  $\psi(x, y) = A \sin(k_1 x) \sin(k_2 y)$ , так как при  $x = 0, y = 0$  волновая функция должна обращаться в нуль.

Возможные значения  $k_1, k_2$  найдем из граничных условий:

$$\psi(a, y) = 0 \rightarrow k_1 = n_1 \pi / a, \text{ где } n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi(x, b) = 0 \rightarrow k_2 = n_2 \pi / b, \text{ где } n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

После подстановки  $\psi(x, y)$  в уравнение Шредингера получаем  $k^2 = k_1^2 + k_2^2$ . И находим значение для энергии:

$$E = (\pi^2 \hbar^2 / 2m)(n_1^2 / a^2 + n_2^2 / b^2).$$

Постоянную  $A$  находим из условия нормировки. В итоге:

$$\psi(x, y) = \sqrt{4/ab} \sin(n_1 \pi x / a) \sin(n_2 \pi y / b).$$

2.28. Воспользовавшись решением задачи 2.27, получаем

$$w = (1/3 - \sqrt{3}/4\pi)^2 = 0,038.$$

2.29. Воспользовавшись решением задачи 2.27 при  $a = b = l$ , получаем  $E = (\pi^2 \hbar^2 / 2ml^2)(n_1^2 + n_2^2)$ . Таким образом, задача об определении энергии сводится к подбору таких наименьших значений  $n_1$  и  $n_2$ , не равных нулю, при которых комбинация целых чисел  $n_1^2 + n_2^2$  имеет четыре наименьших значения. Отсюда находим, что  $E = 2, 5, 8, 10$  единиц величины  $\pi^2 \hbar^2 / 2ml^2$ .

$$2.30. E = \pi^2 \hbar^2 P_m / 4m.$$

2.31. После подстановки в уравнение Шредингера получим

$$\phi'' + k^2 \phi = 0, \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar.$$

Решение этого уравнения ищем в виде  $\phi = A \sin(kr + \alpha)$ . Из требования конечности волновой функции при  $r = 0$  следует  $\alpha = 0$ . Таким образом,  $\psi(r) = (A/r) \sin kr$ . Из граничного условия  $\psi(r_0) = 0$  получаем  $kr_0 = n\pi$ , ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ). Коэффициент  $A$  можно найти

из условия нормировки  $\int_0^{\infty} \psi^2(r) 4\pi r^2 dr = 1$ . Тогда

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mr_0^2}; \quad \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}} \frac{\sin kr}{r}, \quad \text{где } kr_0 = n\pi, \quad (n=1, 2, 3, \dots).$$

2.32. Воспользуемся решением задачи 2.31. Из условия  $\frac{d(r^2 \psi^2)}{dr} = 0$  находим  $r_{\text{вер}} = \frac{\pi}{2k} = r_0/2$ ;  $w = \int_0^{r_0/2} \psi^2(r) 4\pi r^2 dr = 1/2$ .

$$2.33. \langle r \rangle = \int_0^{r_0} r \psi^2(r) 4\pi r^2 dr = r_0/2, \quad \langle r^2 \rangle = \frac{r_0^2}{3} \left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2}\right),$$

$$\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = r_0^2 \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2}\right) / 12.$$

2.34. Уравнения Шредингера для функции  $\phi(r)$  выглядят следующим образом:

$$\phi_1(r \leq r_0) = A \sin(kr + \alpha), \quad k = \sqrt{2mE} / \hbar,$$

$$\phi_2(r > r_0) = B \exp(\beta r) + C \exp(-\beta r), \quad \beta = \sqrt{2m(U - E)} / \hbar.$$

Из требования ограниченности волновой функции во всем пространстве следует, что  $\alpha = 0, B = 0$ . Таким образом,

$$\psi_1(r \leq r_0) = A \frac{\sin kr}{r}, \quad \psi_2(r > r_0) = C \frac{\exp(-\beta r)}{r}.$$

В силу непрерывности самих волновых функций и их производных в точке  $r = r_0$  получаем  $\operatorname{tg} kr_0 = -k/\beta$ , или  $\sin kr_0 = \pm \sqrt{\hbar^2 / 2mr_0^2 U} / k$ , где  $k = \sqrt{2mE} / \hbar$ . Единственный уровень энергии появится при условии, что  $\pi^2 \hbar^2 / 8m < r_0^2 U_0 < 9\pi^2 \hbar^2 / 8m$ .

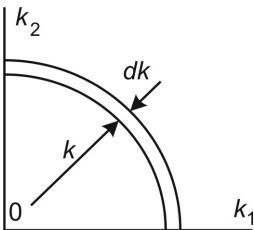


Рис. 1

2.35. Каждому значению пары целых чисел  $(n_1, n_2)$ , входящих в выражение для энергии  $E = (\pi^2 \hbar^2 / 2ml^2)(n_1^2 + n_2^2)$  (см. решение задачи 2.29) и определяющих, соответственно, волновую функцию частицы, соответствует одно состояние. Число состояний в интервале  $(dn_1, dn_2)$  равно  $dN = \int dn_1 dn_2$ ,

где интеграл берется по всем состояниям вблизи значений  $(n_1, n_2)$ , соответствующим фиксированному значению энергии  $E$ . Имея в виду соотношение  $k^2 = k_1^2 + k_2^2 = 2mE/\hbar^2$ , удобно ото-бражать состояния в пространстве чисел  $k_1$  и  $k_2$ . С этой целью построим в « $k$ -пространстве» окружность радиуса  $k$  с центром в начале координат (рис. 1). Тогда число состояний, соответствующих значениям энергии в интервале от  $E$  до  $E + dE$ , будет равно числу состояний между окружностями радиуса  $k$  и  $k + dk$  в первой четверти (отрицательные значения  $k$  не дают новых состояний):

$$dN = \int dn_1 dn_2 = \int \frac{l^2}{\pi^2} dk_1 dk_2 = \frac{l^2}{\pi^2} \frac{2\pi k dk}{4}.$$

После дифференцирования соотношения  $k^2 = k_1^2 + k_2^2 = 2mE/\hbar^2$  получаем

$$dN = \frac{l^2 m}{2\pi\hbar^2} dE.$$

2.36. Решение абсолютно аналогично решению задачи 2.27:

$$E = (\pi^2 \hbar^2 / 2m)(n_1^2 / a^2 + n_2^2 / b^2 + n_3^2 / c^2),$$

где  $n_1, n_2, n_3$  – целые числа, не равные нулю.

2.37. а)  $E = (\pi^2 \hbar^2 / 2ml^2)(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$ , где  $n_1, n_2, n_3$  – целые числа, не равные нулю.  $\Delta E_{34} = \pi^2 \hbar^2 / ml^2$ ;

б) для шестого уровня комбинация чисел  $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 14$  и  $E = 7\pi^2 \hbar^2 / ml^2$ ; кратность вырождения этого уровня равна числу перестановок чисел 1, 2 и 3, т.е. шести.

$$2.38. dN = \frac{abc m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE. \text{ Вывод аналогичен приведенному}$$

в решении задачи 2.35.

2.39. Воспользуемся решением, приведенным в разделе «Квантовая частица в яме конечной глубины», с тем отличием, что для выполнения условия  $\psi(0) = 0$  необходимо брать только

нечетные решения. Для решений с нечетной волновой функцией необходимо выполнение условия:

$$\alpha l = -kl \operatorname{ctg} kl,$$

где  $\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = \alpha^2$ ,  $\frac{2m}{\hbar^2}E = k^2$ .

Уравнение  $\alpha l = -kl \operatorname{ctg} kl$  нетрудно привести к виду

$$\sin kl = \pm kl \sqrt{\hbar^2 / 2ml^2 U_0}.$$

Изобразим графически левую и правую части этого уравнения (рис. 2). Тогда координаты точек пересечения прямых с синусоидой будут определять собственные значения энергии (в силу условия

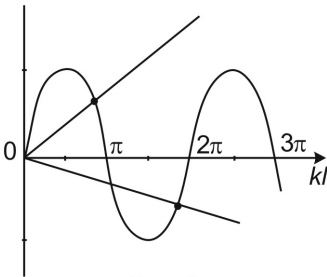


Рис. 2

будут определять собственные значения энергии (в силу условия  $\operatorname{ctg} kl < 0$ , необходимо брать значения синуса в четных четвертях окружности). Видно, что корни уравнения (т.е. связанные состояния) существуют не всегда!

$n$ -й уровень появляется при условии, что  $kl = (2n-1)\pi/2$ , откуда

$$l^2 U_0 = (2n-1)^2 \pi^2 \hbar^2 / 8m.$$

2.40. Из уравнения  $\sin kl = \pm kl \sqrt{\hbar^2 / 2ml^2 U_0}$ , приведенного в предыдущей задаче, следует, что при  $E = U_0/2$  значения синуса удовлетворяют условию:

$$\sin\left(\frac{l\sqrt{mU_0}}{\hbar}\right) = 1/\sqrt{2} \rightarrow \frac{l\sqrt{mU_0}}{\hbar} = 3\pi/4 \text{ (другие значения отбрасываем, так как уровень единственный).}$$

Отсюда следует, что  $l^2 U_0 = 9/16 \pi^2 \hbar^2 / m$ . Произведение  $l^2 U_0$  иногда называют «мощностью» ямы. Из условия  $\frac{d\psi_1}{dx} = 0$ , где  $\psi_1 \sim \sin kx$  находим наи-

более вероятное положение частицы:  $x_{\text{вер}} = \pi/2k = 2l/3$ .

2.43. Воспользуемся решением, рассмотренным в разделе «Квантовая частица в яме конечной глубины» и приведенным в соответствие с обозначениями на рис. 2.22.



Для четных решений должно быть выполнено условие  $ktgka = \alpha$ , где

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ и } \alpha = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Условие  $ktgka = \alpha$  нетрудно привести к виду:

$$\cos^2 ka = \frac{\hbar^2}{2mU_0a^2} (ka)^2 \Rightarrow |\cos ka| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}} ka.$$

При этом (т.к.  $tgka > 0$ ) необходимо учитывать те области, где  $\sin ka > 0$  и  $\cos ka > 0$ .

Для нечетных решений получаем  $|\sin ka| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}} ka$  и, так как  $ctgka < 0$ , необходимо учитывать те области, где  $\sin ka$  и  $\cos ka$  имеют разные знаки. Графическое решение полученных уравнений изображено на рис. 3.

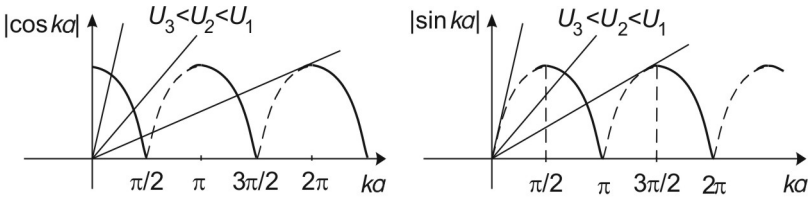


Рис. 3

Видно, что в зависимости от величины  $U_0$  (при данном  $a$ ) или в зависимости от величины  $a$  (при данном  $U_0$ ) в случае четных волновых функций всегда есть хотя бы одно решение. Это будет при выполнении условия

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}} < \frac{1}{\pi/2} \text{ или } U_0a^2 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}.$$

$$2.44. E_1 = \pi^2 \hbar^2 / 18ma^2.$$

$$2.45. U_0 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{9ma^2} = 16,6 \text{ эВ}; E_i = \frac{\pi^2\hbar^2}{6ma^2} = 12,45 \text{ эВ}.$$

$$2.46. U_0 = \frac{16\pi^2\hbar^2}{27ma^2} = 11,2 \text{ эВ}; E_i = \frac{U_0}{4} = 2,8 \text{ эВ}.$$

2.47. Задача сводится к решению трансцендентного уравнения  $|\sin ka| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}}ka$ , где  $k^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}$ . Графическое

решение данного уравнения приведено на рис. 4. Минимальная

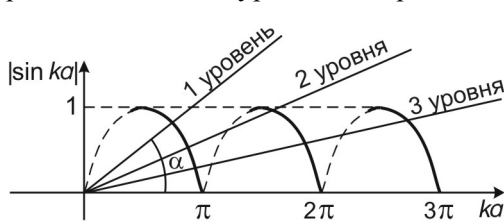


Рис. 4

«мощность» ямы  $U_0a^2$ , при которой появляется первый уровень, равна  $U_0a^2 = \pi^2\hbar^2/8m$ . При этом энергия уровня ( $ka = \pi/2$ ) равна нулю, т.е. уровень находится на «потолке» ямы. При

увеличении  $U_0$  уровень опускается в яму. Следующий уровень появится при  $\text{tg} \alpha = 2/3\pi$  и т.д.

$$2.48. U = E/\sin^2 kd = 1,64 \text{ эВ}, \text{ где } k = \sqrt{2mE}/\hbar = 6,22 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}.$$

$$D \approx \exp(-18\beta d) = 3,5 \cdot 10^{-5}, \text{ где } \beta = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar = 1,9 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1};$$

$\tau = \ln 2/nD = 1,6 \cdot 10^{-11} \text{ с}$ , где  $n = \sqrt{2E/m}/2d = 1,22 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$  — частота ударов о стенки ямы.

$$2.49. a = \pi\hbar/\sqrt{8mU_0} \approx 3,1 \cdot 10^{-10} \text{ м (см. решение задачи 2.47);}$$

$$\tau = 1/nD = 1,2 \cdot 10^{-11} \text{ с}, \text{ где } D \approx \exp(-598\beta a) = 8,4 \cdot 10^{-5},$$

$$n = \sqrt{2E/m}/2a - \text{частота ударов о стенки ямы},$$

$$\beta = \sqrt{2m(E - U)}/\hbar = 5,08 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}.$$

2.50. Ширина зоны  $\Delta E \approx \hbar/\tau \approx 0,91 \text{ эВ}$ , где  $\tau = 1/nD$  — время туннелирования,  $D \approx \exp(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mU_0}d) \approx e^{-3,25}$  — проникаемость барьера,  $n = \vartheta/a = 1,15 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$  — частота ударов о стенки ямы,  $\vartheta = \pi\hbar/ma$  — скорость электрона.

$$2.51. U_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8a^2 \mu} + E = 42 \text{ МэВ, где } \mu - \text{приведенная масса}$$

в случае задачи о двух телах (нейтрон и протон в дейтроне) и равная приблизительно половине массы протона.

## ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР. АТОМ ВОДОРОДА

$$3.1. \text{ а) } E = \hbar\omega/2; \text{ б) } E = 3\hbar\omega/2.$$

$$3.2. E_n = \hbar\omega(n + 1/2).$$

$$3.3. A_0 = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}, \quad A_1 = \alpha \left(\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}, \quad A_2 = \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}.$$

$$3.4. x_{\text{вер}} = 1/\alpha.$$

$$3.5. x_1 = 0, x_2 = \pm \frac{\sqrt{5/2}}{\alpha}.$$

$$3.6. x_{\text{ср.кв}} = \frac{1}{\alpha\sqrt{2}}, \quad \langle |x| \rangle = \frac{2}{\alpha\sqrt{\pi}}.$$

$$3.7. \text{ а) } x_0 = \frac{1}{\alpha}; \text{ б) введем переменную } \xi = \alpha x; \text{ тогда}$$

$$w = \int_1^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi / \int_0^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi = 0,049.$$

3.8. Уравнение Шредингера для заданной конфигурации поля в области  $x > 0$  такое же, как и для линейного осциллятора. Поэтому его решения будут такими же, как и для осциллятора при нечетных значениях  $n$ , так как  $\psi(0) = 0$ . Это же относится и к собственным значениям энергии, которые можно представить в виде  $E = \hbar\omega(2\nu + 3/2)$ , где  $\nu = 0, 1, 2, \dots$  Видно, что при одном и том же значении частоты энергия основного состояния данного осциллятора превышает энергию основного состояния линейного осциллятора в три раза.

3.9. Воспользуемся методом разделения переменных, т.е. будем искать решение в виде  $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ . После подстанов-

ки в уравнение Шредингера получим для каждой функции  $X, Y, Z$  уравнения следующего типа:

$$X'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_x - k_x x^2 / 2)X = 0,$$

где сумма  $E_x + E_y + E_z$  должна быть равна полной энергии  $E$ . Эти уравнения совпадают с уравнениями для одномерного осциллятора, для которого известны собственные функции  $\psi_\alpha$  и собственные значения энергии. Поэтому можем записать:

$$\Psi_{\alpha\beta\gamma} = \psi_\alpha(x) \psi_\beta(y) \psi_\gamma(z),$$

где  $\alpha, \beta, \gamma$  – некоторые целые числа. Выражение для энергии приобретает вид:  $E_n = \hbar\omega(n + 3/2)$ , где  $n = \alpha + \beta + \gamma$ . Число различных комбинаций чисел  $\alpha, \beta, \gamma$ , сумма которых равна  $n$ , дает кратность вырождения  $n$ -го уровня. Для определения этого числа комбинаций найдем сначала число возможных троек чисел  $\alpha, \beta, \gamma$  при фиксированном значении  $\alpha$ . Оно равно числу возможных значений  $\beta$  (или  $\gamma$ ), т.е. равно  $n - \alpha + 1$  ( $\beta$  может меняться от 0 до  $n - \alpha$ ). Тогда полное число комбинаций из  $\alpha, \beta, \gamma$  при заданном значении  $n$  (т.е. кратность вырождения) будет равно:

$$N = \sum_{\alpha=0}^n (n - \alpha + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

3.10.  $A = 1/\sqrt{\pi r_0^3}$ ,  $r_0 = \hbar^2 / kme^2$ ,  $E = -\hbar^2 / 2mr_0^2 = -kme^4 / 2\hbar^2$ , где  $k = 1/4\pi\epsilon_0$ .

3.11.  $E = -k^2 me^4 / 8\hbar^2$  (уровень энергии с главным квантовым числом  $n = 2$ ), где  $k = 1/4\pi\epsilon_0$ .

3.12.  $r_{\text{вер}} = r_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2$ , вероятность нахождения электрона в области  $r < r_{\text{вер}}$  равна  $1 - 5/e^2 = 0,323$ .

$$3.13. \langle r \rangle = 3r_0 / 2, \langle r^2 \rangle = 3r_0^2, \langle (\Delta r)^2 \rangle = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = 3r_0^2 / 4,$$

где  $r_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / me^2$ .

$$3.14. \langle r \rangle / r_{\text{вср}} = 3/2 .$$

$$3.15. P = 13/e^4 = 0,238 .$$

$$3.16. \langle F \rangle = 2ke^2 / r_0, \langle U \rangle = -ke^2 / r_0, \text{ где } k = 1/4\pi\epsilon_0 .$$

$$3.17. r_{\text{вср}} = 4r_0, \langle r \rangle = 5r_0 .$$

$$3.18. \text{ Введем понятие объемной плотности заряда } \rho = -e\psi^2 .$$

$$\text{Тогда для потенциала можно записать } \varphi_0 = \int \frac{k\rho}{r} 4\pi r^2 dr = -\frac{ke}{r_0},$$

$$\text{где } k = 1/4\pi\epsilon_0 .$$

## КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛЕ

4.1. Среднюю энергию одного электрона можно найти как отношение полной энергии всех электронов проводимости, кото-

рая равна  $\int_0^{E_F(0)} Eg(E)dE$ , к полному числу электронов, равному

$\int_0^{E_F(0)} g(E)dE$ . После вычисления интегралов получаем

$$\langle E \rangle = 3E_F(0)/5 .$$

$$4.2. dn(p) = \frac{p^2 dp}{\pi^2 \hbar^3} \left[ \exp\left(\frac{p^2/2m - E_F}{kT}\right) + 1 \right]^{-1} \text{ при } T \neq 0K ,$$

$$dn(p) = \frac{p^2 dp}{\pi^2 \hbar^3} \text{ при } T = 0K .$$

$$4.3. \eta = 1 - 1/\sqrt{8} = 0,65 .$$

$$4.4. T \approx 3 \cdot 10^4 \text{ К}.$$

$$4.5. \Delta E = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mV(3\pi^2 n)^{1/3}} = 1,8 \cdot 10^{-22} \text{ эВ}.$$

$$4.6. \vartheta_{\text{вср}} = \vartheta_{\text{max}} = \sqrt{2E_F(0)/m} = 1,6 \cdot 10^6 \text{ м/с};$$

$$\langle \vartheta \rangle = 3\vartheta_{\text{max}}/4 = 1,2 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

$$4.7. n(\lambda)d\lambda = 8\pi\lambda^{-4} d\lambda .$$

4.8. Давление электронного газа находится как интеграл от произведения импульса, передаваемого стенке при падении каждого электрона  $2m\vartheta \cos \alpha$  ( $\alpha$  – угол между нормалью к поверхности и скоростью), на число падающих за единицу времени на единичную площадку электронов. Число падающих ежесекундно на единичную площадку электронов со скоростями в интервале  $(\vartheta, \vartheta + d\vartheta)$  в интервале углов  $(\alpha, \alpha + d\alpha)$  с нормалью к поверхности равно:

$$dN = n(\vartheta) d\vartheta \frac{2\pi \sin \alpha d\alpha}{4\pi} \vartheta \cos \alpha.$$

После интегрирования по  $\alpha$  от 0 до  $\pi/2$  и по скорости от 0 до  $\vartheta_{\max} = \sqrt{2E_F(0)/m}$  получаем:

$$p = \frac{\hbar^2}{15\pi^2 m} (3\pi^2 n)^{5/3} = 5 \cdot 10^9 \text{ Па}.$$

4.9. Введем для удобства пространство скоростей с осями  $\vartheta_x, \vartheta_y, \vartheta_z$ . Число электронов, проекции скоростей которых находятся в интервале  $d\vartheta_x, d\vartheta_y, d\vartheta_z$ , пропорционально объему  $d\vartheta_x d\vartheta_y d\vartheta_z$ . В то же время число электронов, модули скорости которых лежат в интервале  $(\vartheta, \vartheta + d\vartheta)$ , пропорционально объему сферического слоя в этом же пространстве, т.е. величине  $4\pi\vartheta^2 d\vartheta$ . Поэтому можно записать:

$$n(\vec{\vartheta}) d\vartheta_x d\vartheta_y d\vartheta_z = n(\vartheta) d\vartheta \frac{d\vartheta_x d\vartheta_y d\vartheta_z}{4\pi\vartheta^2 d\vartheta}. \quad (*)$$

Кроме того, учтем, что  $n(\vartheta) d\vartheta = n(E) dE$ ,  $E = m\vartheta^2/2$  и  $dE/d\vartheta = \sqrt{2mE}$ . Подставляя эти соотношения и выражение для концентрации свободных электронов  $n(E)$  по формуле (4.1) в правую часть (\*), получаем требуемое соотношение.

$$4.10. E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 \rho N_A / \mu)^{2/3} = 1,50 \text{ эВ}.$$

## ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

6.1. Примем за начало отсчета энергии потолок валентной зоны. Тогда уровень, соответствующий дну зоны проводимости, будет равен  $\Delta E$ . Пренебрегая единицей в знаменателе выражения (4.1), получаем для концентрации свободных электронов

$$n_n = \int_{\Delta E}^{\infty} n(E) dE = 2(mkT / 2\pi\hbar^2)^{3/2} \exp[(E_F - \Delta E) / kT].$$

Так как полная вероятность заполнения какого-либо уровня электроном или дыркой равна единице, то функция распределения для дырок будет равна:  $f_p = 1 - f_n = \exp[(E - E_F) / kT]$ ;

тогда концентрация дырок будет равна  $n_p = \int_{-\infty}^0 f_p g_p dE$ , где

$$g_p dE = g_n dE = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{-E} dE.$$

И для концентрации дырок получаем:

$$n_p = 2(mkT / 2\pi\hbar^2)^{3/2} \exp(-E_F / kT).$$

Так как в чистом полупроводнике концентрации электронов и дырок равны, то

$$E_F - \Delta E = -E_F \rightarrow E_F = \Delta E / 2,$$

т.е. уровень Ферми находится посередине запрещенной зоны. Физически это означает, что, в силу электронейтральности образца, вероятности возбуждения электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне с уровня Ферми должны быть одинаковыми. Следовательно,

$$n_n = n_p = 2(mkT / 2\pi\hbar^2)^{3/2} \exp(-\Delta E / 2kT),$$

где  $\Delta E$  – ширина запрещенной зоны.

6.2. а) Примем за начало отсчета энергии потолок валентной зоны. Тогда для концентрации электронов проводимости находим

$$n_n = \int_{\Delta E}^{\infty} n(E) dE = 2(mkT / 2\pi\hbar^2)^{3/2} \exp[(E_F - \Delta E) / kT].$$

В то же время концентрация электронов связана с концентрацией донорных атомов соотношением:

$$n_n = n_0 [1 - f(0)] \approx n_0 \exp(-E_F / kT).$$

Перемножив последние два выражения, находим

$$n_n^2 = 2n_0 (mkT / 2\pi\hbar^2)^{3/2} \exp(-\Delta E / kT),$$

откуда и следует формула, приведенная в тексте задачи.

б) Сравнивая полученные выше два различных выражения для  $n_n$ , вычисляем

$$E_F = \frac{\Delta E}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left[ \frac{2}{n_0} \left( \frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right].$$

$$6.3. \quad \alpha = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT} = -\frac{\Delta E}{2kT^2} = -\frac{\pi\hbar c}{\lambda_0 kT^2} = -0,047 \text{ K}^{-1}. \text{ Здесь учтено,}$$

что  $\rho \sim \exp(\Delta E / 2kT)$ ,  $\Delta E$  – ширина запрещенной зоны.

$$6.4. \quad E = \frac{2kT_1T_2}{T_2 - T_1} \ln \eta = 0,34 \text{ эВ.}$$

$$6.5. \quad \langle t \rangle = \tau / \ln \frac{(\rho_0 - \rho_1)\rho_2}{(\rho_0 - \rho_2)\rho_1} = 10 \text{ мс.}$$

$$6.6. \quad \frac{\sigma_1}{\sigma_2} = 2,28.$$

## КОНТАКТНЫЕ И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

6.7. Взяв ось  $X$  перпендикулярно границе раздела металлов, запишем закон сохранения энергии для электронов, переходящих из металла с потенциальной энергией свободных электронов  $U_1$  в металл с энергией  $U_2$ :

$$m\vartheta_{x1}^2 / 2 + U_1 = m\vartheta_{x2}^2 / 2 + U_2.$$

Кроме того, должны быть выполнены условия:  $\vartheta_{y1} = \vartheta_{y2}$ ,  $\vartheta_{z1} = \vartheta_{z2}$ .

Число электронов, падающих каждую секунду на единицу площади, равно:

$$dN_1 = \vartheta_{x1} n(\vartheta_1) d\vartheta_1, \quad dN_2 = \vartheta_{x2} n(\vartheta_2) d\vartheta_2.$$



При динамическом равновесии  $dN_1 = dN_2$ . Это равенство с учетом соотношения  $\vartheta_{x1} d\tilde{\vartheta}_1 = \vartheta_{x2} d\tilde{\vartheta}_2$ , которое следует из закона сохранения энергии, дает  $n(\tilde{\vartheta}_1) = n(\tilde{\vartheta}_2)$ . Учитывая выражение для концентрации свободных электронов, полученное в задаче (4.9),

$$n(\vartheta) d^3 \vartheta = 2(m/2\pi\hbar)^3 (1 + \exp[(E - E_F)/kT])^{-1} d^3 \vartheta,$$

находим, что  $E_1 - E_{F1} = E_2 - E_{F2}$ . Поскольку  $E_1 + U_1 = E_2 + U_2$ , получаем:

$$E_{F1} + U_1 = E_{F2} + U_2.$$

Если вспомнить, что уровень Ферми отсчитывается от дна потенциальной ямы, то последнее и означает, что уровни Ферми действительно находятся на одной высоте.

6.8. Запишем условия, которым должны удовлетворять электроны, вылетающие из металла:

$$m\vartheta_x'^2/2 = m\vartheta_x^2 + U, \quad \vartheta_y' = \vartheta_y, \quad \vartheta_z' = \vartheta_z. \quad (*)$$

Здесь знаком «штрих» отмечены компоненты скорости электрона внутри металла,  $U$  – потенциальный барьер на границе металла, равный  $U = E_F + A$ ,  $A$  – работа выхода с поверхности металла. Число электронов, вылетающих ежесекундно с единицы поверхности металла со скоростью в интервале  $(\vartheta, \vartheta + d^3 \vartheta)$ , с учетом формулы, полученной в задаче (4.9), равно:

$$dN = \vartheta_x' n(\vartheta') d^3 \vartheta' = 2\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{\vartheta_x' d^3 \vartheta'}{1 + \exp[(E' - E_F)/kT]},$$

где  $d^3 \vartheta' = d\vartheta_x' d\vartheta_y' d\vartheta_z'$ .

Из соотношения (\*) следует, что  $\vartheta_x' d^3 \vartheta' = \vartheta_x d^3 \vartheta$ . Учтем также, что  $E' - E_F = E + A$ . Тогда при  $A \gg kT$  выражение для  $dN$  можно представить в виде:

$$dN = 2(m/2\pi\hbar)^3 \exp[-(A + E)/kT] \vartheta_x d^3 \vartheta.$$

В сферических координатах можно записать:

$$\vartheta_x = \vartheta \cos \theta \quad \text{и} \quad d^3 \vartheta = d\vartheta_x d\vartheta_y d\vartheta_z = \vartheta \sin \theta d\varphi \times d\vartheta \times \vartheta d\theta.$$

Тогда после интегрирования  $dN$  в сферических координатах по  $\phi$  от 0 до  $2\pi$  и по  $\theta$  от 0 до  $\pi/2$  приходим к выражению, указанному в условии задачи.

$$6.9. \langle E \rangle = 2kT; j = (mek^2 / 2\pi^2 \hbar^3) T^2 \exp(-A/kT).$$

## ПЕРЕХОДЫ ДЖОЗЕФСОНА

7.1. Поскольку переходы включены параллельно, то разности фаз на переходах будут равны, и тогда токи через переходы будут пропорциональны их критическим значениям:  $J_1 = 0,417$  мА,  $J_2 = 0,583$  мА.

$$7.2. \frac{V_{\max} - V_{\min}}{2} = j_c R_T.$$

7.3. В соответствии с условиями задачи представим ток в следующем виде:  $J = J_0 + J_1 \sin(2\pi \nu t)$ . Разность фаз на переходе будем искать в виде  $\delta = \delta_0 + \delta_1$ , где  $\delta_0$  – разность фаз, создаваемая постоянным током  $J_0$ . Добавку  $\delta_1$  будем полагать малой. В этом случае напряжение на переходе будет равно:  $V = (\Phi_0 / 2\pi) d\delta_1 / dt$  ( $\Phi_0$  – квант магнитного потока). Представим производную  $d\delta_1 / dt$  в виде:  $d\delta_1 / dt = (dJ / dt)(dJ / d\delta_1)^{-1}$ . Учитывая соотношение  $J = J_c \sin \delta$  и полагая  $\delta_1$  малым, нетрудно получить

$$V = \frac{\Phi_0 \nu J_1}{\sqrt{J_c^2 - J_0^2}} \sin(2\pi \nu t + \pi/2).$$

Амплитуда напряжения будет равна 0,58 нВ. Кроме того, так как напряжение опережает ток по фазе на  $\pi/2$ , то переход ведет себя как индуктивность  $L = \Phi_0 / (2\pi \sqrt{J_c^2 - J_0^2})$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Савельев И.В. Курс общей физики. В 3 т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И.В. Савельев. – 2-е изд., испр. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. – 304 с.
2. Сивухин Д.В. Атомная и ядерная физика: Учебное пособие. В 2-х ч. Ч. 1. Атомная физика / Д.В. Сивухин. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1986. – 416 с.
3. Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике. В 9 т. Т. 8, 9 / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М.: Мир, 1978. – 524 с.
4. Смит Р. Полупроводники / Р. Смит. – 2-е изд. – М.: Мир, 1982. – 558 с.
5. Офир Дж. Физика. В 2 т. Т. 2 / Дж. Офир. – М.: Мир, 1981. – 622 с.
6. Иродов И.Е. Задачи по квантовой физике: учеб. пособие для физ. специальностей вузов / И.Е. Иродов. – М.: Высшая школа, 1991. – 175 с.
7. Сборник задач по общему курсу физики: учеб. пособие для вузов. В 3 ч. Ч. 3. Атомная и ядерная физика. Строение вещества / под ред. В.А. Овчинкина. – М.: Изд-во МФТИ, 2001. – 432 с.
8. Сборник задач по общему курсу физики. Атомная физика, физика ядра и элементарных частиц / под ред. Д.В. Сивухина. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1981. – 224 с.
9. Кулик И.О. Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах / И.О. Кулик, И.К. Янсон. – М.: Наука, главная редакция физико-математической литературы, 1970. – 276 с.

Учебное издание

**Паршаков Александр Николаевич**

**КУРС ЛЕКЦИЙ  
ПО КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ**

*Учебное пособие*

Редактор и корректор *Л.С. Лыкова*

Изд. лиц. ЛР № 020370

---

Подписано в печать 29.12.2006. Формат 60×90/16.

Усл. печ. л. 12,25. Тираж 150 экз. Заказ № 22/2006.

---

Издательство

Пермского государственного технического университета  
Адрес: 614990, г. Пермь, Комсомольский проспект, 29, к. 113.  
тел.: (342) 219-80-33