И. И. Коваленко, Н. П. Лавровская

КУРС ФИЗИКИ

В 6 частях

Учебное пособие

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
АЭРОКОСМИЧЕСКОГО ПРИБОРОСТРОЕНИЯ

И. И. Коваленко, Н. П. Лавровская

Часть 5

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Учебное пособие

ГУАП

Санкт-Петербург
2023

УДК 53
ББК 22.3
К56

Рецензенты:
доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАЕН *Н. Р. Галль*;
доктор физико-математических наук *С. П. Помыткин*

Утверждено
редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного пособия

Протокол № 2 от 20 марта 2023 г.

Коваленко, И. И.

К56 Курс физики: учеб. пособие: в 6 ч. Ч. 5: Квантовая физика / И. И. Коваленко, Н. П. Лавровская. – СПб.: ГУАП, 2023. – 112 с.

ISBN 978-5-8088-1849-1

Приведен теоретический материал по курсу «Физика». Главное внимание уделено разъяснению сути физических законов и их осмысленному применению.

В пятой части представлены разделы «Квантовая механика», «Статистическая физика и физика твердого тела», которые в большинстве вузов изучаются во II и III семестрах. Объем пособия рассчитан на изучение дисциплины в течение трех-четырех семестров.

Предназначено для студентов и преподавателей вузов всех технических направлений и специальностей. Соответствует рабочим программам по дисциплине «Физика» в рамках ФГОС3++.

УДК 53
ББК 22.3

ISBN 978-5-8088-1849-1

© Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, 2023

ВВЕДЕНИЕ

Уважаемые читатели, перед вами пятая часть курса физики, написанного для студентов, получающих высшее техническое образование. Казалось бы, все вы изучали физику в школе. Что нового может быть в этой книге?

Чтобы глубоко освоить физику, нужно один и тот же материал изучить несколько раз на разном уровне. Сначала в 7–9 классах вы только знакомились с физическими величинами, явлениями, законами. Это было действительно первое знакомство. Более серьезно, более глубоко тот же материал должен изучаться в 10–11 классах.

В вузе студенты снова изучают физику, которая, как любая точная наука, основана на аппарате высшей математики. Большинство разделов современной математики возникло из необходимости количественного описания физических явлений и построения физических моделей и теорий.

Физика базируется на математическом анализе, аналитической геометрии, алгебре и других разделах высшей математики. Студент должен уметь дифференцировать, интегрировать, работать с векторами и с комплексными числами.

Физика – это фундаментальная дисциплина, формирующая мировоззрение и культуру человека. Научное мировоззрение основано как на полученных знаниях, так и на приобретаемых в процессе обучения навыках и умениях. В свою очередь, знания, умения и навыки, полученные в процессе изучения физики, в дальнейшем используются в других дисциплинах. Физика – это фундамент для всех естественно-научных и очень многих специальных технических дисциплин.

В пятой части «Курса физики» изложен материал по квантовой механике и основам статистической физики. Настоящее пособие следует рассматривать не как альтернативу лекциям по физике, а как дополнение к ним. Каждый лектор один и тот же материал преподает по-разному. Несомненно, некоторые вопросы на лекциях будут изложены иначе, возможно, что проще и короче. К пособию обращайтесь в том случае, когда лекция пропущена или в ней что-то непонятно.

При чтении лекций и написании этого пособия авторы опирались на классические учебники по физике для вузов, которые перечислены в конце пособия. К сожалению, ни один из них в силу ряда причин не может сегодня быть единственным учебником по физике для студентов ГУАП.

В учебном пособии С. Э. Фриша и А. В. Тиморевой [1] сложные понятия и явления описаны кристально ясно. Однако этот учебник рассчитан на более длительное, глубокое и серьезное изучение физики. Учебники И. Е. Иродова [2] и И. В. Савельева [3] написаны для студентов технических вузов и вполне доступны для студентов.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

1. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ

В 1924 году Луи де Бройль выдвинул гипотезу о том, что корпускулярно-волновой дуализм имеет место не только для света, но и для иных объектов материального мира, например микрочастиц. Если для света очень долго недооценивали корпускулярные свойства, то для прочих объектов мы до сих пор вообще ничего не говорили о волновых свойствах. При этом для всех микрочастиц справедливы такие же формулы, как и для фотонов:

$$E = h\nu, \qquad p = \frac{h}{\lambda}.$$

Движение любой микрочастицы связано с волной, имеющей частоту и длину:

$$\nu = \frac{E_{\text{K}}}{h}, \tag{1.1}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{1.2}$$

Что дает эта гипотеза? Она объясняет первый постулат Бора, почему образуются стационарные состояния, в которых электрон находится, не излучая. Найдем длину волны де Бройля для электрона на боровской орбите. Воспользуемся формулой для скорости электрона на боровской орбите с номером n (36.3), взятой из [4]:

$$\left.\begin{aligned} \upsilon_n &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar\cdot n} \\ \lambda &= \frac{h}{m\upsilon} = \frac{2\pi\hbar}{m\upsilon_n} \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{2\pi\cdot 4\pi\varepsilon_0\hbar^2\cdot n}{me^2};$$

$$\lambda_n = \frac{8\pi^2\varepsilon_0\hbar^2\cdot n}{me^2}. \tag{1.3}$$

Сравним ее с радиусом орбиты, найденным по формуле (36.5), взятой из того же источника:

$$\frac{\lambda_n}{r_n} = \frac{8\pi^2\varepsilon_0\hbar^2\cdot n}{me^2}\cdot\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2\cdot n^2} = \frac{2\pi}{n}.$$

$$2\pi r_n = n\cdot\lambda_n \quad n = 1, 2, 3, 4 \ldots \tag{1.4}$$

На боровской орбите с номером n укладывается ровно n волн де Бройля. Возникает стоячая волна, которая, как известно, никуда не бежит и не излучает.

В стационарных состояниях образуется стоячая волна де Бройля.

Нужно понимать, что эта волна не представляет какой-либо самостоятельный колебательный процесс. Она лишь характеризует волновые свойства движущейся частицы. Для электрона с массой покоя m=9,11·10^{-31} кг, летящего со скоростью $\upsilon \sim 10^6$ м/с, она равна:

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{6{,}63 \cdot 10^{-34}}{9{,}11 \cdot 10^{-31+6}} \approx 0{,}7^{-9} \text{(м)},$$

что соответствует рентгеновскому диапазону электромагнитных волн. Для макроскопического тела массой 1 г, двигающегося со скоростью 1 см/с, она исчезающе мала:

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon} = \frac{6{,}63 \cdot 10^{-34}}{1 \cdot 10^{-3-2}} \approx 0{,}7^{-30} \text{(м)}$$

и никоим образом не может быть зафиксирована.

Чем легче частица, тем проще наблюдать ее волновые свойства. Самая легкая из всех известных к началу XX века частиц – электрон, к тому же, он имеет электрический заряд. Поэтому потоком электронов легко управлять при помощи электрических и магнитных полей.

В 1927 году К. Дэвиссон и Л. Джермер экспериментально наблюдали дифракцию электронов на монокристалле никеля и тем самым подтвердили их волновые свойства. Экспериментаторы пошли дальше. По ускоряющему напряжению они с помощью формулы де Бройля вычислили длину волны электрона и рассчитали картину дифракции соответствующих эксперименту волн на кристалле. Оказалось, что рассчитанная теоретически картина дифракции электронов на кристаллической решетке очень хорошо совпадала с наблюдаемой на эксперименте. Иными словами, максимальный отраженный пучок электронов наблюдался при том же самом угле, что и для рентгеновских лучей с той же длиной волны.

В опыте Дэвиссона – Джермера не только были доказаны волновые свойства электронов, но и проверена формула де Бройля.

В 1928 году были опубликованы результаты опытов, проведенных независимо друг от друга, П. С. Тартаковским и Дж. П. Томсо-

ном. Пучок электронов падал на очень тонкую (меньше микрометра) металлическую фольгу. В этих опытах образец был поликристаллическим. Дифракция наблюдалась в виде концентрических колец на фотопластинке. В опытах Тартаковского исследовались электроны с энергиями до 1,7 кэВ, в опытах Томпсона – с энергиями в несколько десятков кэВ.

Оставался открытым вопрос, что же засвечивает фотопластинку, электроны или вторичные рентгеновские лучи, возникающие при торможении электронов[1]. Для ответа на этот вопрос установка была помещена в поперечное магнитное поле, в котором электроны должны отклониться, а рентгеновские лучи – нет. Таким образом, в опытах Томпсона – Тартаковского было установлено, что фотопластинку засвечивают именно электроны.

> В опытах Томсона и Тартаковского было еще раз подтверждено, что электроны дифрагируют, то есть имеют волновые свойства.

Пучок дифрагировавших электронов отклоняется в магнитном поле. Значит, в этот момент электроны являются частицами.

> В опытах Томсона и Тартаковского было доказано, что превращение электрона может происходить как из частицы в волну, так и наоборот – из волны в частицу.

Оставался открытым еще один вопрос. Волновые свойства – это свойства коллективные, проявляющиеся только в ансамбле частиц[2], или индивидуальные, присущие каждой частице в отдельности?

Ответ на этот вопрос был получен в опыте Л. Бибермана, Н. Сушкина и В. Фабриканта в 1949 году. Ученые наблюдали дифракцию электронов в очень слабых электронных пучках. Поток электронов был таков, что в любой момент времени через установку пролетало не более одной частицы. Регистрация в таком случае была очень длительной, но в результате получалась точно такая же дифракционная картина, как и от пучка частиц большой интенсивности.

> В опыте Бибермана, Сушкина и Фабриканта было доказано, что волновыми свойствами обладает каждая частица в отдельности.

---

[1] Рентгеновское излучение, возникающее при торможении электронов, описано в [4] (п. 26).

[2] Волну, бегущую по стадиону, не может создать один человек. Она возникает лишь при согласованных действиях большого числа болельщиков.

В опытах О. Штерна в 1930 году было показано, что волновыми свойствами обладают атомные (гелий) и молекулярные (водород) пучки. Убедительное доказательство справедливости формулы де Бройля и наличия волновых свойств у частиц было получено в опытах по дифракции нейтронов на кристаллах.

Поток одинаковых частиц, летящих в одном направлении с одинаковыми скоростями, обладает волновыми свойствами согласно формулам (1.1), (1.2).

2. КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ

До сих пор микрочастицы рассматривались как очень мелкие классические объекты, которые по умолчанию двигаются по траекториям. В любой момент времени частица имеет координаты и скорость. Гипотеза де Бройля предполагает наличие у этих частиц волновых свойств. Это предположение, подтвержденное опытами Дэвиссона – Джермера, Томсона – Тартаковского, Бибермана – Сушкина – Фабриканта, Штерна и другими, наделяет частицы волновыми свойствами, которые решительно противоречат корпускулярным свойствам. Эти свойства несовместимы друг с другом. Объект может быть либо волной, либо частицей, но никак не тем и другим сразу.

Отметим также, что волновые и корпускулярные свойства никогда не проявляются одновременно. Для их наблюдения нужно ставить разные опыты. И все-таки противоречие имеется.

Датский ученый Н. Бор предложил считать, что волновые и корпускулярные свойства микрочастиц не противоречат, а дополняют друг друга. Это два взгляда на один объект с противоположных сторон. Только принимая сразу оба этих взгляда, мы не упускаем ничего. В этом состоит философский принцип дополнительности, сформулированный Бором сначала для света, потом для микрочастиц, а потом и для многих других явлений.

В заключение отметим, что в случае света речь шла об электромагнитных волнах, а при рассмотрении микрочастиц – о вероятностных волнах – волнах де Бройля.

3. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Частица, летящая в направлении оси ox, обладает волновыми свойствами, то есть является волновым пакетом длиной Δx (рис. 3.1). На опыте частицу можно обнаружить в любой точке этого интервала.

В спектре такого пакета кроме длины волны λ присутствует некоторый интервал длин волн $\Delta\lambda$. Связано это с тем, что показанная волна не является монохроматической, отрезок синусоиды – это не синусоида. Чем длиннее волновой пакет, тем меньше $\Delta\lambda$ и тем «монохроматичнее» волна. На рис. 3.2 приведен спектр волнового пакета как функция длины волны.

В теории рядов и преобразований Фурье доказывается, что отношение длины волны λ к интервалу длин волн $\Delta\lambda$ равно числу совершенных колебаний N:

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = N, \ \frac{\Delta x}{\lambda} = N, \ \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{\Delta x}{\lambda}; \quad \frac{\Delta\lambda\,\Delta x}{\lambda^2} = 1, \ \frac{h\Delta\lambda}{\lambda^2}\Delta x = h.$$

Импульс микрочастицы

$$p = \frac{h}{\lambda}, \ \Rightarrow \ \Delta p \ = \left|\frac{dp}{d\lambda}\right|\Delta\lambda \ = \left|-\frac{h}{\lambda^2}\right|\Delta\lambda \ = \ \frac{h\Delta\lambda}{\lambda^2}.$$

Получаем соотношение неопределенностей для координаты x и проекции импульса на эту ось:

$$\Delta p_x \Delta x = h.$$

В этой формуле Δx – длина волнового пакета, то есть неопределенность интервала, в котором можно обнаружить частицу; Δp_x – неопределенность проекции импульса частицы на ось ox. Если под неопределенностью иметь в виду среднее квадратичное отклонение, то в правой части соотношения будет не h, а $\hbar/2$. Кроме того,

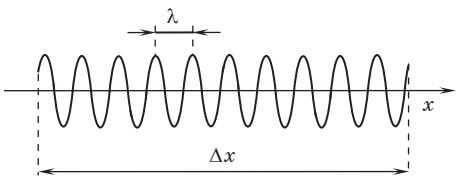

Рис. 3.1. Волновой пакет

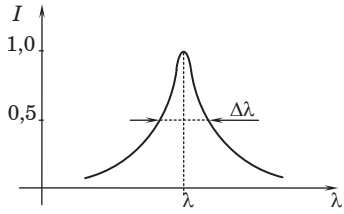

Рис. 3.2. Спектр волнового пакета

нужно учесть, что в реальном опыте ошибки измерений, то есть неопределенности, могут быть больше:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \qquad (3.1)$$

Аналогичные соотношения можно сформулировать в направлении других координатных осей:

$$\Delta p_y \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta p_z \Delta z \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Рассмотрим частицу с энергией E, которая в соответствие с (1.1) имеет некоторую частоту колебаний ν. Любой реальный процесс когда-то начинается и когда-то заканчивается. Поэтому на оси времени имеется отрезок синусоиды длительностью Δt, или волновой пакет, показанный на рис. 3.3.

В спектре такого пакета кроме частоты ν присутствует некоторый интервал частот $\Delta\nu$. Связано это с тем, что эта волна не монохроматическая, поскольку отрезок синусоиды – это не синусоида. Чем длиннее промежуток времени Δt, тем меньше $\Delta\nu$ и тем «монохроматичнее» волна. На рис. 3.4 приведен спектр волнового пакета как функция частоты.

В теории рядов и преобразований Фурье доказывается, что отношение частоты ν к интервалу частот $\Delta\nu$ равно числу совершенных колебаний N:

$$\frac{\nu}{\Delta\nu} = N; \ \frac{\Delta t}{T} = N; \ \frac{\nu}{\Delta\nu} = \frac{\Delta t}{T}; \ \Rightarrow \ \Delta\nu \Delta t = \nu T = 1.$$

Домножим последнее выражение слева и справа на постоянную Планка h:

$$h\Delta\nu \Delta t = h.$$

Энергия микрочастицы $E = h\nu$, поэтому $h\Delta\nu$ – неопределенность энергии.

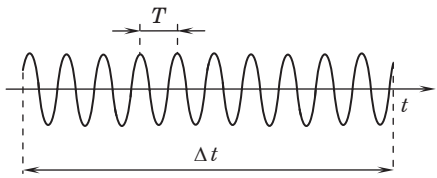

Рис. 3.3. Волновой пакет

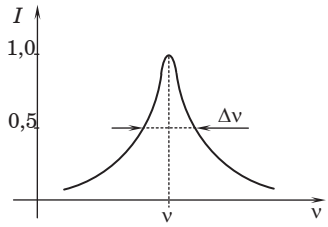

Рис. 3.4. Спектр волнового пакета

Получаем соотношение неопределенностей для энергии частицы и времени:

$$\Delta E \Delta t = h.$$

Здесь Δt – время, в течение которого частица имеет энергию E, то есть неопределенность времени обнаружения частицы; ΔE – неопределенность энергии частицы. Если под неопределенностью иметь в виду среднее квадратичное отклонение, то h следует заменить на $\hbar/2$. Кроме того, в реальном опыте неопределенности, то есть ошибки измерений, могут быть больше:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{3.2}$$

Аналогичные соотношения можно сформулировать для момента импульса и угла поворота φ:

$$\Delta L \Delta \varphi = \frac{\hbar}{2}. \tag{3.3}$$

Не следует считать, что неопределенности величин, фигурирующих в формулах (3.1)–(3.3), обусловлены несовершенством измерительных приборов.

Сами величины в названных формулах не существуют с большей точностью.

4. ПОСТУЛАТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. Состояние квантовой частицы задается волновой функцией, зависящей от ее координат и времени. Свойства волновой функции сформулированы в следующем параграфе.

Волновые функции подчиняются принципу суперпозиции.

Если в состоянии с волновой функцией Ψ_1 некоторое измерение приводит к результату X_1, а в состоянии Ψ_2 – к результату X_2, то всякая функция вида:

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

описывает состояние, в котором измерение дает либо результат X_1, либо X_2.

2. Всякой физической величине А в квантовой механике сопоставлен линейный самосопряженный оператор $\hat{A}$. Все функциональные отношения между физическими величинами заменяются отношениями между операторами.

Физическая величина А может принимать лишь собственные значения a операторного уравнения:

$$\hat{A}\Psi = a\Psi.$$

3. Среднее значение физической величины А, имеющей квантово-механический оператор $\hat{A}$ в состоянии Ψ, определяется соотношением:

$$\overline{A} = \int\limits_{(V)} \Psi^* \hat{A}\Psi dV.$$

Звездочка * здесь и в дальнейшем обозначает знак комплексного сопряжения.

4. Волновая функция состояния системы Ψ получается при решении уравнения Шрёдингера:

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

в котором $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + E_{\text{п}}$ – оператор Гамильтона.

В свою очередь в этом операторе ∇^2 – оператор Лапласа; $E_{\text{п}}$ – потенциальная энергия системы.

Собственные значения оператора Гамильтона – это значения энергии в стационарных состояниях.

В этих состояниях:

– энергия принимает любые значения, если движение частицы не ограничено в пространстве;

– энергия принимает дискретные значения, если движение частицы ограничено в пространстве;

– дискретное состояние задается набором квантовых чисел, их количество определяется числом степеней свободы.

5. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Вспомним уравнение волны, бегущей в произвольном направлении, полученное в п. 52 [5], и, воспользовавшись четностью функции косинус, преобразуем его:

$$S(\vec{r},t) = A \cdot \cos\left(\omega t - \left(\vec{\kappa}\vec{r}\right)\right) = A\cos\left(\left(\vec{\kappa}\vec{r}\right) - \omega t\right) =$$

$$= A\,\mathrm{Re}\left(e^{i\left(\left(\vec{\kappa}\vec{r}\right)-\omega t\right)}\right) = A\,\mathrm{Re}\left(e^{(i/\hbar)\left(\left(\vec{p}\vec{r}\right)-Et\right)}\right).$$

Допускаем, что волна может быть комплексной, и перепишем окончательно:

$$\Psi(\vec{r},t) = A \cdot e^{\frac{i\left(\left(\vec{p}\vec{r}\right)-Et\right)}{\hbar}}. \tag{5.1}$$

Мы получили волновую функцию частицы с импульсом $\vec{p}$ и энергией E, летящей в произвольном направлении. Какими свойствами она обладает?

Свойства волновой функции:

– однозначность;

– конечность;

– непрерывность функции по всем переменным;

– непрерывность первой производной функции по любой переменной;

– условие нормировки.

Пятое условие вытекает из физического смысла волновой функции. А смысл ее по М. Борну статистический. Частицу обнаружить можно везде, где волновая функция не равна нулю. Вероятность ее обнаружения dW пропорциональна элементу объема dV, в котором ее ищут, и квадрату модуля волновой функции:

$$dW = \left|\Psi\right|^2 dV = \Psi\Psi^* dV. \tag{5.2}$$

Сама волновая функция не наблюдаема. В эксперименте регистрируется частица с вероятностью, пропорциональной квадрату модуля волновой функции. Вероятность обнаружить частицу во всем пространстве равна единице, поэтому:

$$\int\limits_{(V)} \left|\Psi\right|^2 dV = \int\limits_{(V)} \Psi\Psi^* dV = 1. \tag{5.3}$$

Волновая функция получается при решении уравнения Шрёдингера. На этом свойстве волновых функций следует остановиться подробнее.

6. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

Запишем формулу (5.1) в координатной форме и дважды продифференцируем ее по переменной x:

$$\Psi(x,y,z,t) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_x x + p_y y + p_z z - Et\right)}. \qquad (6.1)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{ip_x}{\hbar} \cdot A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_x x + p_y y + p_z z - Et\right)};$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{ip_x}{\hbar}\right)^2 A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_x x + p_y y + p_z z - Et\right)} = -\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)^2 A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_x x + p_y y + p_z z - Et\right)};$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)^2 \Psi.$$

Аналогичные выражения получается и для других координат:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = -\left(\frac{p_y}{\hbar}\right)^2 \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\left(\frac{p_z}{\hbar}\right)^2 \Psi.$$

Сложим три выражения, поделим на удвоенную массу и преобразуем:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\left(\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{\hbar^2}\right)\Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right) = \frac{p^2}{2m}\Psi;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = E_{\text{К}}\Psi. \qquad (6.2)$$

В этом выражении ∇^2 – оператор Лапласа; $E_{\text{К}} = \frac{p^2}{2m}$ – кинетическая энергия. Добавим к обеим частям (6.2) произведение потенциальной энергии на волновую функцию:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + E_{\text{П}}\Psi = E_{\text{К}}\Psi + E_{\text{П}}\Psi;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + E_{\Pi}\Psi = E\Psi. \qquad (6.3)$$

Продифференцируем функцию (6.1) по времени:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\cdot A\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_x x + p_y y + p_z z - Et\right)} = \frac{E\Psi}{i\hbar};$$

$$i\hbar\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi. \qquad (6.4)$$

В формулах (6.3) и (6.4) равны правые части, значит, равны и левые:

$$i\hbar\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + E_{\Pi}\Psi. \qquad (6.5)$$

Уравнение (6.5) называется *нестационарным уравнением Шрёдингера* или просто *уравнением Шрёдингера*.

Вернемся к функции (6.1) и перепишем ее:

$$\Psi(\vec{r},t) = A\cdot e^{\frac{i\left((\vec{p}\vec{r})-Et\right)}{\hbar}} = A\cdot e^{\frac{i(\vec{p}\vec{r})}{\hbar}}\cdot e^{\frac{-iEt}{\hbar}} = A\cdot e^{\frac{i(\vec{p}\vec{r})}{\hbar}}\cdot e^{-i\omega t};$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\cdot e^{-i\omega t}. \qquad (6.6)$$

Здесь $\psi(\vec{r})$ – *координатная часть волновой функции*. Обычно ее тоже называют волновой функцией. Это не совсем верно, но более коротко и общепринято. Множитель $e^{-i\omega t}$ – это *временна́я часть волновой функции,* о которой никогда не следует забывать.

Подставим волновую функцию в форме (6.6) в уравнение (6.3). При этом учтем, что для оператора Лапласа временна́я часть волновой функции является константой:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\left(\psi e^{-i\omega t}\right) + E_{\Pi}\left(\psi e^{-i\omega t}\right) = E\left(\psi e^{-i\omega t}\right);$$

$$-\left(\cancel{e^{-i\omega t}}\right)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \left(\cancel{e^{-i\omega t}}\right)E_{\Pi}\psi = \left(\cancel{e^{-i\omega t}}\right)E\psi;$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + E_{\Pi}\psi = E\psi. \qquad (6.7)$$

Получилось *стационарное уравнение Шрёдингера*, которое очень часто для краткости тоже называют просто уравнением Шрёдингера. Значение уравнения Шрёдингера в квантовой механике такое же, как значение второго закона Ньютона в классической механике. Уравнение Шрёдингера невозможно вывести строго логически[1].

[1] Наш вывод опирался на конкретный вид волновой функции, поэтому он не является строгим.

7. СТОЛКНОВЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ С ПОТЕНЦИАЛЬНЫМ БАРЬЕРОМ

Рассмотрим поток микрочастиц с энергией E, летящих в направлении оси ox от $-\infty$ к $+\infty$. В точке $x=0$ поток налетает на потенциальный барьер с энергией U, как это показано на рис. 7.1.

Напишем стационарное уравнение Шрёдингера для отрицательных значений x:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{\mathrm{I}} + E_{\Pi}\psi_{\mathrm{I}} = E\psi_{\mathrm{I}}.$$

Учтем, что в одномерном случае оператор Лапласа заменяется второй производной по x. Также учтем, что в области I потенциальная энергия частицы равна нулю:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{\mathrm{I}}(x) = E\psi_{\mathrm{I}}(x);$$

$$\psi''_{\mathrm{I}}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0.$$

Поскольку в области I есть только кинетическая энергия, а она всегда неотрицательна, вводим обозначение:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{7.1}$$

Отмечаем, что $\kappa \geq 0$, и продолжаем:

$$\psi''_{\mathrm{I}}(x) + \kappa^2\,\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0. \tag{7.2}$$

Решением этого уравнения является функция, состоящая из двух слагаемых:

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A\cdot e^{i\kappa x} + B\cdot e^{-i\kappa x}. \tag{7.3}$$

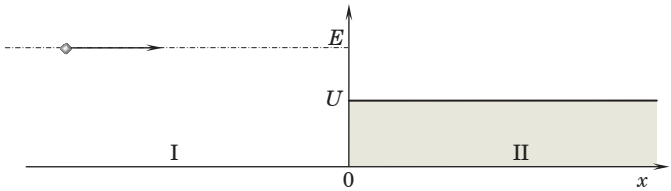

Рис. 7.1. Микрочастица налетает на бесконечный потенциальный барьер

Первое слагаемое – это волна, бегущая в области I слева направо, то есть падающая на барьер. Второе слагаемое – это волна, бегущая в области I справа налево, то есть отраженная от барьера.

Напишем стационарное уравнение Шрёдингера для положительных значений координаты x:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{\text{II}}(x)+E_{\text{п}}\psi_{\text{II}}(x)=E\psi_{\text{II}}(x).$$

Снова учтем, что в одномерном случае оператор Лапласа заменяется второй производной по x. Также учтем, что в области II потенциальная энергия частицы равна энергии барьера U:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{\text{II}}(x) + U\psi_{\text{II}}(x) = E\psi_{\text{II}}(x);$$

$$\psi''_{\text{II}}(x) + \frac{2m\left(E-U\right)}{\hbar^2}\cdot\psi_{\text{II}}(x) = 0.$$

Рассмотрим случай низкого потенциального барьера, когда $E > U$. Вводим обозначение:

$$\kappa' = \frac{\sqrt{2m\left(E-U\right)}}{\hbar}. \tag{7.4}$$

Под корнем стоит неотрицательная величина. Также отмечаем, что $\kappa' \geq 0$, и продолжаем:

$$\psi''_{\text{II}}(x) + \kappa'^2\,\psi_{\text{II}}(x) = 0. \tag{7.5}$$

Решением этого уравнения в общем случае является функция, состоящая из двух слагаемых:

$$\psi_{\text{II}}(x) = C\cdot e^{i\kappa' x} + D\cdot e^{-i\kappa' x}.$$

Первое слагаемое – это волна, бегущая в области II слева направо, то есть прошедшая на барьер. Второе слагаемое – это волна, бегущая справа налево, то есть отраженная от чего-то. Отразиться в области II не от чего, поэтому второго слагаемого в функции $\psi_{\text{II}}(x)$ нет, $D=0$:

$$\psi_{\text{II}}(x) = C\cdot e^{i\kappa' x}. \tag{7.6}$$

Волновая функция должна быть непрерывной во всех точках, в том числе и при $x=0$:

$$\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0); \quad A\cdot e^{i\kappa 0} + B\cdot e^{-i\kappa 0} = C\cdot e^{i\kappa' 0};$$

$$A + B = C. \tag{7.7}$$

Первая производная волновая функция тоже должна быть непрерывной в точке с координатой $x=0$:

$$\psi'_{\mathrm{I}}(0) = \psi'_{\mathrm{II}}(0); \quad i\kappa \cdot A \cdot e^{i\kappa 0} - i\kappa \cdot B \cdot e^{-i\kappa 0} = i\kappa' \cdot C \cdot e^{i\kappa' 0};$$

$$\kappa\left(A - B\right) = \kappa' C. \tag{7.8}$$

Домножаем соотношение (7.7) на κ' и сравниваем с соотношением (7.8):

$$\kappa'(A + B) = \kappa(A - B);$$

$$\kappa' A + \kappa' B = \kappa A - \kappa B; \; B(\kappa + \kappa') = A(\kappa - \kappa');$$

$$\frac{B}{A} = \frac{(\kappa - \kappa')}{(\kappa + \kappa')}.$$

Мы выразили амплитуду отраженной волны через амплитуду падающей. Вероятность ρ отражения частицы от потенциального барьера пропорциональна квадрату модуля волновой функции. Значит, коэффициент отражения частиц от барьера ρ пропорционален квадрату полученного отношения коэффициентов:

$$\rho = \left|\frac{B}{A}\right|^2.$$

$$\rho = \left|\frac{(\kappa - \kappa')}{(\kappa + \kappa')}\right|^2. \tag{7.9}$$

Каждая частица либо проходит над барьером, либо отражается от него, поэтому коэффициент пропускания τ связан с коэффициентом отражения ρ равенством:

$$\tau + \rho = 1.$$

Найдем таким способом коэффициент пропускания τ, принимая во внимание, что в выражении (7.9) все величины вещественные положительные:

$$\tau = 1 - \frac{(\kappa - \kappa')^2}{(\kappa + \kappa')^2} = \frac{(\kappa + \kappa')^2 - (\kappa - \kappa')^2}{(\kappa + \kappa')^2} =$$

$$= \frac{\left(\kappa^2 + 2\kappa\kappa' + \kappa'^2\right) - \left(\kappa^2 - 2\kappa\kappa' + \kappa'^2\right)}{(\kappa + \kappa')^2};$$

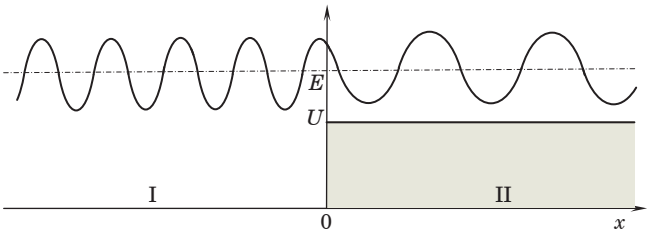

Рис. 7.2. Волновая функция по обе стороны низкого потенциального барьера

$$\tau = \frac{4\kappa\kappa'}{(\kappa + \kappa')^2}. \tag{7.10}$$

Вспоминая обозначения (7.1) и (7.4), перепишем получившиеся формулы (7.9) и (7.10):

$$\rho = \left| \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U}} \right|^2; \tag{7.9.a}$$

$$\tau = \frac{4\sqrt{E(E - U)}}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - U}\right)^2}. \tag{7.10.a}$$

Хотя энергия частиц E больше энергии барьера U, и, казалось бы, все они должны преодолеть этот барьер, все равно некоторые частицы отражаются $(\rho \neq 0, \tau \neq 1)$.

На рис. 7.2 показана волновая функция по обеим сторонам потенциального барьера. Длина волны над барьером больше, чем перед барьером. Это связано с тем, что кинетическая энергия частиц уменьшилась. Вместе с ней уменьшился импульс, а значит, согласно формуле (1.2) увеличилась длина волны.

Теперь рассмотрим случай высокого потенциального барьера, когда $E < U$. В этом случае κ' будет мнимым числом $\kappa' = i\text{æ}$:

$$\text{æ} = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar}. \tag{7.11}$$

Волновая функция в области II описывается вещественной экспонентой:

$$\psi_{\text{II}}(x) = C \cdot e^{-\text{æ}x}. \tag{7.12}$$

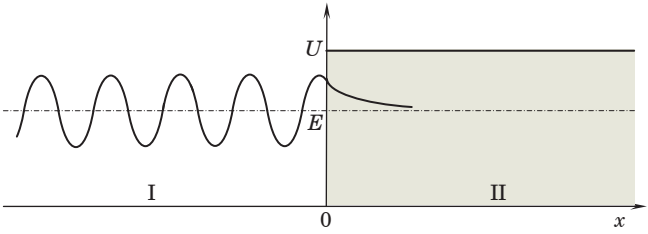

Рис. 7.3. Волновая функция по обе стороны высокого потенциального барьера

Эта формула говорит о том, что в области II нет бегущей волны, есть только колебания, амплитуда которых по мере проникновения в эту область быстро убывает, как показано на рис. 7.3.

Несмотря на мнимость числа κ', все математические выкладки (7.7), (7.8), (7.9) проходят. Для коэффициента отражения от высокого барьера имеем:

$$\rho = \left|\frac{(\kappa - i\text{æ})}{(\kappa + i\text{æ})}\right|^2 = \left(\frac{(\kappa - i\text{æ})}{(\kappa + i\text{æ})}\right)\cdot\left(\frac{(\kappa - i\text{æ})}{(\kappa + i\text{æ})}\right)^* = \\ = \frac{\cancel{(\kappa - i\text{æ})}}{\cancel{(\kappa + i\text{æ})}}\frac{\cancel{(\kappa + i\text{æ})}}{\cancel{(\kappa - i\text{æ})}} = 1. \tag{7.13}$$

Как и следовало ожидать, коэффициент отражения равен единице, то есть от высокого потенциального барьера отражаются все частицы.

Вернемся к функции (7.12), которая при положительных x не равна нулю. Это говорит о том, что отражение происходит не от самой границы, а от некоторой приграничной зоны. Частицы все-таки проникают неглубоко в область II. Есть вероятность обнаружить частицу при малых положительных значениях x. Это явление качественно объясняется при помощи соотношения неопределенностей (3.1).

Частица с импульсом p при отражении от высокого потенциального барьера на очень короткое время останавливается. В этот момент импульс частицы известен очень точно – он равен нулю. Вследствие этого координата частицы оказывается очень неопределенной. Может оказаться, что остановка произошла при некотором положительном значении x. Существует ненулевая вероятность того, что частица будет обнаружена под барьером.

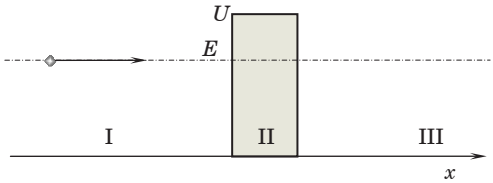

Рис. 7.4. Микрочастица налетает на высокий потенциальный барьер конечной ширины

Теперь рассмотрим высокий потенциальный барьер конечной ширины (рис. 7.4).

В области I волновая функция для потока частиц имеет вид (7.3) и представляет собой наложение падающей и отраженной волн. В области II вид функции – (7.12). Ее мы только что обсуждали. В области III, если частицы там как-то окажутся, их волновая функция так же, как и в области I будет, бегущей волной. Поскольку в этой области справа нет препятствий, от которых частицы могли бы отразиться, есть волна, бегущая слева направо и нет волны, бегущей справа налево:

$$\psi_{\text{III}}(x) = A' \cdot e^{i\kappa x}. \tag{7.14}$$

Параметр κ этой функции точно такой же, как и в области I. Он в обоих случаях определяется формулой (7.1) и имеет смысл волнового числа $\kappa = 2\pi/\lambda$.

Амплитуда прошедшей волны A' в формуле (7.14), разумеется, не равна амплитуде падающей волны A в формуле (7.3). Она определяется тем, в какой мере уменьшилась функция $\psi_{\text{II}}(x)$ от левой до правой границы области II. Вид волновой функции во всех трех областях показан на рис. 7.5.

Поскольку функция $\psi_{\text{II}}(x_2) \neq 0$, в области III есть волна, бегущая слева направо, а значит, есть и частицы, пролетевшие сквозь по-

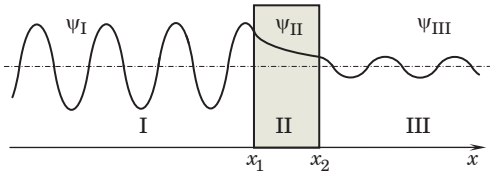

Рис. 7.5. Волновая функция микрочастицы вблизи высокого потенциального барьера

тенциальный барьер. Энергия частиц меньше потенциальной энергии барьера, но частицы все равно проникают сквозь него. Это явление называется *туннельным эффектом*.

> *Туннельный эффект* – это проникновение квантовых частиц сквозь потенциальный барьер, энергия которого больше энергии этих частиц.

Эффект можно качественно объяснить при помощи соотношения неопределенностей (3.2).

Частица с энергией E, налетающая на высокий потенциальный барьер, на короткое время Δt может сама у себя взять взаймы порцию энергии ΔE. В результате энергия частицы окажется достаточной, чтобы пройти над барьером. Через время Δt долг ΔE будет возвращен, но частица к тому моменту окажется уже за барьером.

8. КВАНТОВАЯ ЧАСТИЦА В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С БЕСКОНЕЧНО ВЫСОКИМИ СТЕНКАМИ

Рассмотрим одномерную яму, в которой потенциальная энергия равна нулю при $x \in [0;\ell]$ и обращается в бесконечность за пределами этого интервала (рис. 8.1).

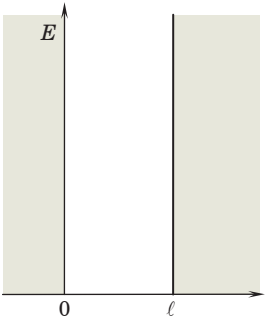

Рис. 8.1. Одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Напишем стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + E_{\Pi}\psi(x) = E\psi(x).$$

Учтем, что в одномерном случае оператор Лапласа заменяется второй производной по x. Также учтем, что в области $x \in [0;\ell]$ потенциальная энергия частицы равна нулю:

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

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\psi(x) = 0.$$

Поскольку, $E_{\Pi} = 0$, а $E_{K} \geq 0$, $\Rightarrow$ $E \geq 0$, вводим обозначение:

$$\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{8.1}$$

Отметим, что $\kappa \geq 0$, и продолжим:

$$\psi''(x) + \kappa^2\cdot\psi(x) = 0. \tag{8.2}$$

За пределами промежутка $[0;\ell]$ $E_{\Pi} \to \infty$. Частица не может находиться вне этого промежутка, она заперта между двумя стенками. Это означает, что за пределами ямы волновая функция равна нулю:

$$\psi(x) = 0 \quad \text{при} \quad x \notin [0;\ell].$$

Из условия непрерывности волновой функции следует, что она должна равняться нулю не только за пределами ямы, но и на ее границе. Получаем граничные условия:

$$\psi(0) = 0; \quad \psi(\ell) = 0. \tag{8.3}$$

Общим решением уравнения (8.2) будет функция:

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

с коэффициентами A и B, которые находятся из граничных условий. Подставляем эту функцию в первое граничное условие:

$$0 = \psi(0) = A\cos(0) + B\sin(0) = A \cdot 1 + B \cdot 0 = A,$$

получаем:

$$A = 0.$$

Следовательно,

$$\psi(x) = B\sin(\kappa x). \tag{8.4}$$

Подставляем функцию (8.4) во второе граничное условие:

$$0 = \psi(\ell) = B\sin(\kappa\ell),$$

получаем:

$$\kappa\ell = \pi n, \quad \text{где} \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{8.5}$$

Подставим обозначение (8.1) и получим:

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\pi n}{\ell}; \quad \Rightarrow \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n^2}{\ell^2};$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m\ell^2}. \tag{8.6}$$

Мы получили правило квантования энергии в одномерной потенциальной яме с бесконечными стенками. Энергия частицы в первом энергетическом состоянии равна:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}.$$

Во втором энергетическом состоянии она в 4 раза больше, в третьем – в 9 раз больше и т. д. (рис. 8.2). Энергия частицы растет с увеличением квантового числа n пропорционально n^2. Очевидно, что с увеличением энергии расстояние между уровнями увеличивается, то есть *уровни разбегаются*:

$$E_n = E_1 n^2.$$

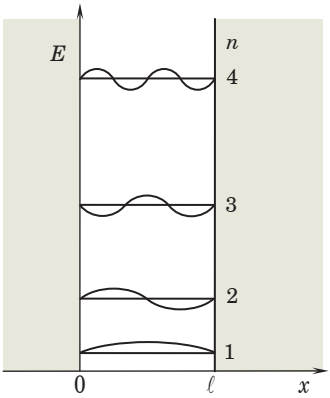

Рис. 8.2. Энергия и волновые функции частицы в потенциальной яме с бесконечными стенками

Вернемся к волновой функции (8.4), ее можно переписать в виде:

$$\psi_n(x) = B\sin\left(\frac{\pi n x}{\ell}\right).$$

Эта функция зависит от квантового числа n, то есть квантуется. В стационарных состояниях она представляет собой стоячие волны. В состоянии с номером n в яме укладывается ровно n полуволн, как это показано на рис. 8.2.

Осталось найти нормировочный коэффициент B. Для этого воспользуемся условием нормировки (5.3) для волновых функций. Учтем, что в этом случае пространство одномерно:

$$1 = \int\limits_{(V)} |\Psi|^2 dV = \int\limits_{(V)} |\psi(x)|^2 dV = \int\limits_0^\ell \psi^2(x)dx = \int\limits_0^\ell B^2 \sin^2\left(\frac{\pi n x}{\ell}\right)dx =$$

$$= B^2\int\limits_0^\ell\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi n x}{\ell}\right)\right)dx = \frac{B^2}{2}\int\limits_0^\ell dx - \frac{B^2}{2}\int\limits_0^\ell \cos\left(\frac{2\pi n x}{\ell}\right)dx =$$

$$= \frac{B^2 x}{2}\Bigg|_0^\ell - \frac{B^2\ell}{4\pi n}\sin\left(\frac{2\pi n x}{\ell}\right)\Bigg|_0^\ell = \frac{B^2\ell}{2} - \frac{B^2\ell}{4\pi n}\sin(2\pi n) + \frac{B^2\ell}{4\pi n}\sin 0 =$$

$$= \frac{B^2\ell}{2} - 0 + 0 = \frac{B^2\ell}{2}; \qquad B^2\ell = 2; \quad \Rightarrow \quad B = \sqrt{\frac{2}{\ell}}.$$

Окончательное выражение для волновой функции:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin\left(\frac{\pi n x}{\ell}\right). \tag{8.7}$$

Отдельно рассмотрим волновую функцию в нулевом состоянии (n=0):

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin\left(\frac{\pi 0 x}{\ell}\right) = 0.$$

Эта функция тождественно равна нулю при любом x, поэтому вероятность частицы оказаться в этом состоянии нулевая. Значит, $n \neq 0$:

$$n = 1, 2, 3, 4, \ldots \tag{8.8}$$

Квантовое число n принимает только натуральные значения.

9. КВАНТОВАЯ ЧАСТИЦА В НЕПРОНИЦАЕМОЙ СФЕРЕ

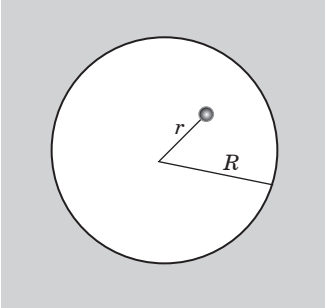

Рис. 9.1. Квантовая частица в непроницаемой сфере

Рассмотрим непроницаемую сферу радиусом R с квантовой частицей внутри. Потенциальная энергия частицы в сфере равна нулю (рис. 9.1).

Постановленная задача предполагает сферическую симметрию, решать ее следует в сферических координатах. Однако фактически мы рассматриваем только одну из координат – r. Радиальная часть оператора Лапласа имеет вид [7]:

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$$

Волновую функцию будем искать в виде:

$$\psi(r) = \frac{\chi(r)}{r}. \tag{9.1}$$

Поскольку волновая функция $\psi(r)$ при любом значении r, в том числе при $r \to 0$, должна быть конечной. Для функции $\chi(r)$ получаем условие:

$$\chi(0) = 0. \tag{9.2}$$

Запишем уравнение Шрёдингера для частицы в сфере:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + E_{\text{П}}\psi(r) = E\psi(r);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^{\cancel{2}}}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\frac{\chi(r)}{r} = E\frac{\chi(r)}{\cancel{r}};$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial}{\partial r}r^2\left(\frac{\chi(r)}{r}\right)' = E\chi(r);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial}{\partial r}\cancel{r^2}\frac{\chi'(r)\cdot r - \chi(r)\cdot r'}{\cancel{r^2}} = E\chi(r);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\left(\chi'(r)\cdot r - \chi(r)\right)' = E\chi(r);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\left(\chi'(r)\cdot r-\chi(r)\right)' = E\chi(r);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\left(\chi''(r)\cdot r+\cancel{\chi'(r)\cdot 1}-\cancel{\chi'(r)}\right) = E\chi(r);$$

$$\chi''(r) + \frac{2mE}{\hbar^2}\cdot\chi(r) = 0.$$

Поскольку $E_{\Pi}=0$, а $E_{\text{К}}\geq 0$, $\Rightarrow$ $E\geq 0$. Вводим обозначение:

$$\kappa=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \tag{9.3}$$

Отметим, что $\kappa\geq 0$, и продолжим:

$$\chi''(r) + \kappa^2\cdot\chi(r) = 0. \tag{9.4}$$

При $r>R$ $E_{\Pi}\to\infty$, частица не может находиться за пределами сферы. Это обозначает, что за ее пределами волновая функция равна нулю. Из свойства непрерывности волновой функции следует, что она должна равняться нулю не только за пределами сферы, но и на ее границе $\psi(R)=0$. Учитывая (9.1), получаем еще одно граничное условие:

$$\chi(R) = 0. \tag{9.5}$$

Первое граничное условие сформулировано выше – это выражение (9.2).

Таким образом, мы имеем дифференциальное уравнение (9.4) и два граничных условия (9.2), (9.5). Наша задача свелась к уже решенной задаче о частице в одномерной потенциальной яме с бесконечными стенками. Мы можем воспользоваться полученными ранее результатами.

Правило квантования энергии микрочастицы в непроницаемой сфере:

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2mR^2}, \tag{9.6}$$

где

$$n=1,2,3,4,\ldots \tag{9.7}$$

Правило квантования волновой функции микрочастицы в непроницаемой сфере:

$$\psi(r) = \frac{\chi_n(r)}{r} = \frac{B}{r} \cdot \sin\left(\frac{\pi n r}{R}\right).$$

В этой формуле квантовое число n тоже принимает значения $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$ Осталось найти нормировочный коэффициент B. Для этого воспользуемся условием нормировки (5.3):

$$1 = \int\limits_{(V)} |\Psi|^2 dV = \int\limits_0^R \psi^2(r) 4\pi r^2 dr = B^2 \int\limits_0^R \frac{1}{\cancel{r^2}} \sin^2\left(\frac{\pi n r}{R}\right) 4\pi \cancel{r^2} dr =$$

$$= 4\pi B^2 \int\limits_0^R \sin^2\left(\frac{\pi n r}{R}\right) dr = 4\pi B^2 \int\limits_0^R \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi n r}{R}\right)\right) dr =$$

$$= \left.\frac{4\pi B^2 r}{2}\right|_0^R - \left.\frac{4\pi B^2 r}{2} \cdot \sin\left(\frac{2\pi n r}{R}\right)\right|_0^R =$$

$$= 2\pi B^2 R - 2\pi B^2 \sin(2\pi n) + 2\pi B^2 \sin(0) = 2\pi B^2 R.$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}}.$$

Окончательное выражение для волновой функции:

$$\psi_n(r) = \frac{\sqrt{\frac{1}{2\pi R}} \sin\left(\frac{\pi n r}{R}\right)}{r}. \qquad (9.8)$$

В стационарных состояниях волновые функции частицы являются стоячими сферическими волнами.

Состояние с квантовым числом n=0 невозможно, поскольку в этом состоянии волновая функция частицы была бы тождественным нулем.

10. КВАНТОВАЯ ЧАСТИЦА В НЕПРОНИЦАЕМОМ ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ЯЩИКЕ

Рассмотрим пустой прямоугольный параллелепипед с квантовой частицей. Потенциальная энергия частицы внутри параллелепипеда равна нулю. Укажем интервалы, в которых может существовать частица (рис. 10.1).

$$\begin{aligned} x &\in [0; \ell_1], \\ y &\in [0; \ell_2], \\ z &\in [0; \ell_3]. \end{aligned} \tag{10.1}$$

Решать задачу будем в декартовых координатах, оператор Лапласа в этом случае есть сумма вторых частных производных по трем переменным:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{10.2}$$

Предположим, что координатную часть волновой функции можно представить в виде произведения трех независимых функций от координат x, y, z:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z). \tag{10.3}$$

За пределами интервалов (10.1) частицу обнаружить невозможно, значит, волновая функция там равна нулю, а значит, она обращается в ноль и на границах этих интервалов. Имеем шесть граничных условий:

$$\begin{aligned} X(0) &= 0; \qquad X(\ell_1) = 0; \\ Y(0) &= 0; \qquad Y(\ell_2) = 0; \\ Z(0) &= 0; \qquad Z(\ell_3) = 0. \end{aligned} \tag{10.4}$$

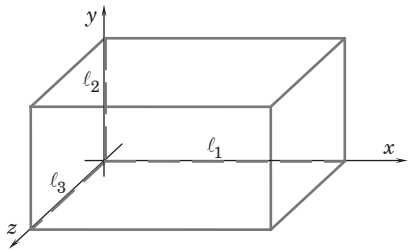

Рис. 10.1. Полость в форме параллелепипеда

Запишем уравнение Шрёдингера для частицы в потенциальном ящике:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)+E_{\Pi}\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(X''(x)YZ+XY''(y)Z+XYZ''(z)\right)=E\cdot XYZ. \qquad (10.5)$$

Поделим левую и правую части уравнения (10.5) на $\hbar^2 XYZ$ и домножим на $2m$:

$$-\left(\frac{X''(x)\cancel{YZ}}{X\cancel{YZ}}+\frac{\cancel{X}Y''(y)\cancel{Z}}{\cancel{X}Y\cancel{Z}}+\frac{\cancel{XY}Z''(z)}{\cancel{XY}Z}\right)=\frac{2mE}{\hbar^2};$$

$$\frac{X''(x)}{X}+\frac{Y''(y)}{Y}+\frac{Z''(z)}{Z}+\frac{2mE}{\hbar^2}=0.$$

Поскольку $E_{\Pi}=0$, полная энергия равна кинетической:

$$E=E_{\text{К}}=\frac{m\upsilon^2}{2}=\frac{p^2}{2m}.$$

Здесь p – импульс частицы, $p^2=p_x^2+p_y^2+p_z^2$.

$$\frac{X''(x)}{X}+\frac{Y''(y)}{Y}+\frac{Z''(z)}{Z}+\frac{\cancel{2m}p^2}{\hbar^2\cancel{2m}}=0;$$

$$\frac{X''(x)}{X}+\frac{Y''(y)}{Y}+\frac{Z''(z)}{Z}+\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{\hbar^2}=0;$$

$$\left(\frac{X''(x)}{X(x)}+\frac{p_x^2}{\hbar^2}\right)+\left(\frac{Y''(y)}{Y(y)}+\frac{p_y^2}{\hbar^2}\right)+\left(\frac{Z''(z)}{Z(z)}+\frac{p_z^2}{\hbar^2}\right)=0. \qquad (10.6)$$

Последнее уравнение состоит из трех блоков. Первый из них написан для направления x, второй – для направления y, третий – для направления z. Поскольку декартовы координаты являются независимыми, каждый из трех блоков в уравнении (10.6) тоже является независимым. Поэтому ноль справа обозначает, что каждый блок равен нулю. Получаем три уравнения:

$$X''(x)+\frac{p_x^2}{\hbar^2}X(x)=0;\ Y''(y)+\frac{p_y^2}{\hbar^2}Y(y)=0;\ Z''(z)+\frac{p_z^2}{\hbar^2}Z(z)=0.$$

Вводим обозначения $\kappa_x = p_x/\hbar$; $\kappa_y = p_y/\hbar$; $\kappa_z = p_z/\hbar$ и переписываем:

$$X''(x) + \kappa_x^2 \cdot X(x) = 0;$$
$$Y''(y) + \kappa_y^2 \cdot Y(y) = 0; \qquad (10.7)$$
$$Z''(z) + \kappa_z^2 \cdot Z(z) = 0.$$

Объединяя написанные уравнения с граничными условиями (10.4), получаем три задачи для частицы в одномерной потенциальной яме, которые уже были решены. Воспользуемся полученными ранее результатами – формулой (8.6):

$$\kappa_x \ell_1 = \pi n_1, \quad \Rightarrow \quad p_x = \frac{\pi n_1 \hbar}{\ell_1}, \quad \text{где} \quad n_1 = 0, 1, 2, 3, \ldots$$
$$\kappa_y \ell_2 = \pi n_2, \quad \Rightarrow \quad p_y = \frac{\pi n_2 \hbar}{\ell_2}, \quad \text{где} \quad n_2 = 0, 1, 2, 3, \ldots$$
$$\kappa_z \ell_3 = \pi n_3, \quad \Rightarrow \quad p_z = \frac{\pi n_3 \hbar}{\ell_3}, \quad \text{где} \quad n_3 = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad (10.8)$$

Кинетическая, а значит, и полная энергия частицы равна:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n_1^2}{2m\ell_1^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n_2^2}{2m\ell_2^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n_3^2}{2m\ell_3^2}.$$

Энергия частицы квантуется, зависит от трех квантовых чисел n_1, n_2, n_3:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{\ell_1^2} + \frac{n_2^2}{\ell_2^2} + \frac{n_3^2}{\ell_3^2}\right). \qquad (10.9)$$

Квантовые числа n_1, n_2, n_3 принимают любые разрешенные значения, не обязательно равные друг другу. Формулу (10.9) можно рассматривать как обобщение формулы (8.6) на трехмерный случай.

Рассмотрим систему энергетических уровней электрона, запертого в полости с размерами ℓ_1 =1 нм, ℓ_2 =2 нм, ℓ_3 =3 нм. В этом случае формула (10.9) численно записывается в виде:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = 3{,}760 \cdot \left(\frac{n_1^2}{1} + \frac{n_2^2}{4} + \frac{n_3^2}{9}\right) \text{ эВ}.$$

Ниже приведены сведения о плотности энергетических уровней в различных диапазонах энергии:

Энергия, эВ	Кол-во уровней
0–10	5
10–20	15
20–30	20
30–40	29
40–50	33
50–60	34
60–70	46

Из приведенных данных видно, что с увеличением энергии расстояние между уровнями уменьшается, то есть *уровни сбегаются*. Для одномерной ямы в п. 8 был сделан противоположный вывод. В трехмерном случае сбегание уровней связано с большим количеством комбинаций из различных значений трех квантовых чисел, которые возможны в формуле (10.9).

Вернемся к волновой функции, которую мы искали, в виде (10.3). Каждая из функций $X(x)$, $Y(y)$, $Z(z)$ должна иметь вид, аналогичный (8.7):

$$X_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell_1}}\sin\left(\frac{\pi n_1 x}{\ell_1}\right);$$

$$Y_{n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{\ell_2}}\sin\left(\frac{\pi n_2 y}{\ell_2}\right);$$

$$Z_{n_3}(z) = \sqrt{\frac{2}{\ell_3}}\sin\left(\frac{\pi n_3 z}{\ell_3}\right);$$

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z) =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\ell_1}\frac{2}{\ell_2}\frac{2}{\ell_3}}\cdot\sin\left(\frac{\pi n_1 x}{\ell_1}\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi n_2 y}{\ell_2}\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi n_3 z}{\ell_3}\right);$$

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{V}}\cdot\sin\left(\frac{\pi n_1 x}{\ell_1}\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi n_2 y}{\ell_2}\right)\cdot\sin\left(\frac{\pi n_3 z}{\ell_3}\right). \quad (10.10)$$

Эта функция зависит от квантовых чисел n_1, n_2, n_3, то есть квантуется.

В этом выражении V – объем потенциального ящика.

Формулу (10.10) можно рассматривать как обобщение формулы (8.7) на трехмерный случай. В стационарных состояниях она представляет собой стоячие волны.

Если хотя бы одно из квантовых чисел n_1, n_2, n_3 будет равно нулю, то вся функция (10.10) обращается в ноль. Это значит, что вероятность частицы находиться в этом состоянии равна нулю. Значит, ни одно из квантовых чисел не может обращаться в ноль:

$$n_1 = 1,\ 2,\ 3, \ldots$$
$$n_2 = 1,\ 2,\ 3, \ldots$$
$$n_3 = 1,\ 2,\ 3, \ldots \qquad (10.11)$$

Все квантовые числа n_1, n_2, n_3 принимают только натуральные значения.

11. КВАНТОВЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Рассмотрим одномерный осциллятор, то есть систему, в которой действует возвращающая сила, подчиняющаяся закону Гука:

$$F_x = -kx.$$

Потенциальная энергия одномерного гармонического осциллятора равна:

$$E_{\Pi} = \frac{kx^2}{2}.$$

Учитывая связь жесткости k и массы m маятника с циклической частотой собственных колебаний $\omega = \sqrt{k/m}$, переписываем последнюю формулу:

$$E_{\Pi} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \qquad (11.1)$$

Функция (11.1) представляет собой квадратичную параболу (рис. 11.1).

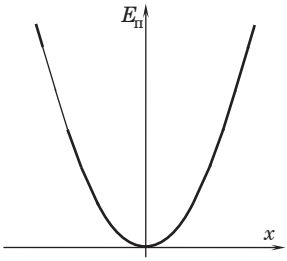

Рис. 11.1. Потенциальная энергия гармонического осциллятора

Движение частицы не ограничено какой-либо непроницаемой стенкой, поэтому в данной задаче нет граничных условий.

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера для одномерного гармонического осциллятора. Оператор Лапласа заменим второй производной по x:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + E_{\Pi}\psi(x) = E\psi(x);$$

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

Домножим последнее уравнение на $2m$, поделим $\hbar^2$ и преобразуем:

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \qquad (11.2)$$

Ищем решение получившегося уравнения для основного состояния осциллятора в виде функции:

$$\psi_0(x) = B \cdot e^{-\frac{E_{\Pi}}{\hbar\omega}} = B \cdot e^{-\frac{m\omega^{\cancel{2}} x^2}{2\hbar\cancel{\omega}}}; \ \psi_0(x) = B \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \qquad (11.3)$$

Найдем вторую производную этой функции:

$$\psi_0'(x) = -\frac{\cancel{2}m\omega x}{\cancel{2}\hbar} B \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} = -\frac{m\omega x}{\hbar} \cdot \psi_0(x).$$

$$\psi_0''(x) = -\left(\frac{m\omega x}{\hbar}\right)' \cdot \psi_0(x) - \frac{m\omega x}{\hbar} \cdot \psi_0'(x) =$$

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

Теперь функцию (11.3) и ее вторую производную подставим в уравнение (11.2):

$$-\frac{m\omega}{\hbar} \cdot \cancel{\psi_0(x)} + \left(\frac{m\omega x}{\hbar}\right)^2 \cdot \cancel{\psi_0(x)} + \frac{2mE_0}{\hbar^2} \cancel{\psi_0(x)} - \frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} \cdot \cancel{\psi_0(x)} = 0;$$

$$-\frac{m\omega}{\hbar} + \cancel{\left(\frac{m\omega x}{\hbar}\right)^2} + \frac{2mE_0}{\hbar^2} - \cancel{\frac{m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2}} = 0; \quad \frac{\cancel{m}\omega}{\cancel{\hbar}} = \frac{2\cancel{m}E_0}{\hbar^{\cancel{2}}};$$

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{11.4}$$

Осциллятор не может иметь нулевую энергию. Минимальная энергия осциллятора задается формулой (11.4). Существование нулевых колебаний можно объяснить с помощью соотношения неопределенностей.

Если бы частица оказалась на дне потенциальной ямы, то ее импульс равнялся бы нулю, то есть был бы известен очень точно. Координата частицы тоже была бы известна очень точно, она тоже равнялась бы нулю. Вместе это противоречило бы соотношению неопределенностей (3.1):

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

При возбуждении осциллятора энергия к величине E_0 может добавляться только порциями $\Delta E = \hbar\omega$. Поэтому энергия осциллятора в возбужденном состоянии задается формулой:

$$E_n = (n + 0{,}5)\,\hbar\omega. \tag{11.5}$$

Энергетические уровни квантового осциллятора показаны на рис. 11.2. Эти уровни эквидистантны, то есть расположены на оди-

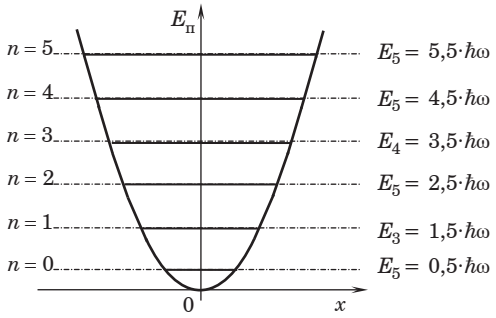

Рис. 11.2. Уровни энергии гармонического осциллятора

наковом расстоянии друг от друга. Переход между двумя любыми соседними уровнями сопровождается испусканием или поглощением одинаковой порции энергии $\Delta E = \hbar\omega$, где ω – частота собственных колебаний осциллятора.

Сравним формулу (11.5) с формулой (24.2) из [5], предложенной Планком[1]. Планк не учитывал нулевых колебаний, тем не менее правильно вывел распределение спектральной плотности излучения абсолютно черного тела – формула (24.9) в [5].

Волновые функции осциллятора в возбужденном состоянии ищутся как произведение волновой функции основного состояния $\psi_0(x)$ на полином Эрмита $P_n(x)$. Названные полиномы обладают важными свойствами:

– полином $P_n(x)$. имеет на промежутке $x \in (-A; A)$ ровно n различных вещественных корней, где A – амплитуда колебаний осциллятора;

– полином $P_n(x)$. обязательно является либо четной, либо нечетной функцией; четность функции определяется высшей степенью полинома – n;

– степень полинома n – это квантовое число соответствующего состояния;

– при переходе осциллятора из одного состояния в другое четность волновой функции должна измениться. Квантовое число n должно уменьшиться или увеличиться на единицу – $\Delta n = \pm 1$.[2]

[1] Это сравнение физически оправдано, поскольку при рассмотрении теплового излучения М. Планк использовал модель гармонических осцилляторов.

[2] Последнее свойство называется правилом отбора квантового числа n.

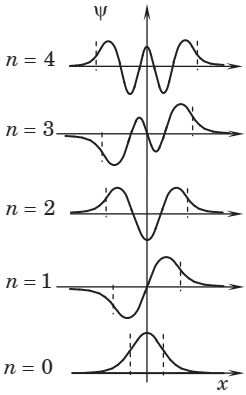

Рис. 11.3. Волновые функции квантового осциллятора

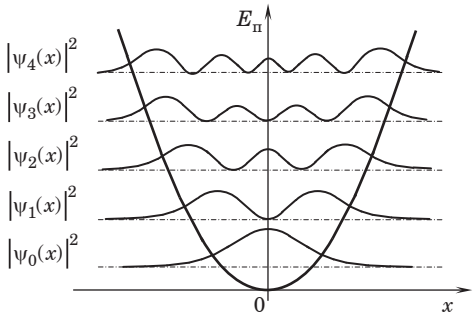

Рис. 11.4. Плотность вероятности обнаружения частицы

Волновые функции гармонического осциллятора показаны на рис. 11.3. Пунктиром показана классическая амплитуда колебаний. Видно, что функции не обращаются в ноль при $x \geq A$.

На рис. 11.4 показаны плотности вероятности обнаружения частицы, то есть $|\psi|^2$. Область за пределами параболы на рис. 11.1 недоступна для классических частиц. Однако, как видно из рис. 11.4, квадрат модуля волновой функции за пределами этой параболы в ноль не обращается. Значит, существует ненулевая вероятность обнаружения частицы за пределами классической амплитуды колебаний.

Колеблющаяся частица при $|x|=A$ меняет направление движения. Ее импульс в точке поворота равен нулю, то есть известен абсолютно точно. Из соотношения неопределенностей (3.1) для импульса-координаты следует, что неопределенность координаты при этом будет очень большой. Частица может развернуться где угодно, в том числе и за пределами классической амплитуды колебаний.

12. КВАНТОВЫЙ РОТАТОР

Ротатор – это материальная точка, вращающаяся вокруг неподвижного силового центра в общем случае по поверхности сферы. В классической физике для кинетической энергии ротатора имеем:

$$E_{\text{К}} = \frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{mr^2\omega^2}{2} = \frac{I\omega^2}{2} = \frac{(I\omega)^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}.$$

Таким образом, кинетическая энергия равна:

$$E_{\text{К}} = \frac{L^2}{2I}. \qquad (12.1)$$

Здесь m – масса материальной точки; υ – ее скорость; ω – угловая скорость вращения; $I = mr^2$ – момент инерции материальной точки; $L = I\omega$ – момент импульса ее орбитального движения.

Запишем уравнение Шрёдингера для ротатора:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + E_{\text{П}}\psi = E\psi; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \left(E - E_{\text{П}}\right)\psi; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E_{\text{К}}\psi.$$

Подставляем кинетическую энергию ротатора (12.1):

$$-\frac{\hbar^2}{\cancel{2}m}\nabla^2\psi = \frac{L^2}{\cancel{2}I}\psi. \qquad (12.2)$$

Сначала рассмотрим *одномерный ротатор* – материальную точку, вращающуюся по окружности вокруг оси *oz*. Такой ротатор еще называют *жестким*. Для этой модели удобно перейти к полярной системе координат (r, φ), в которой переменным будет только угол φ. Элементарное перемещение вдоль траектории $d\ell = r \cdot d\varphi$. Оператор Лапласа в одномерном случае перепишется в виде:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \ell^2} = \frac{\partial^2}{\partial(\varphi r)^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \qquad (12.3)$$

В этой формуле учтено, что для жесткого ротатора r=const.

Продолжим преобразовывать уравнение Шрёдингера для жесткого ротатора, подставим (12.3) в (12.2):

$$-\frac{\hbar^2}{mr^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial \varphi^2} = \frac{L^2}{I}\psi.$$

Сократим моменты инерции жесткого ротатора слева и справа:

$$-\frac{\hbar^2}{\cancel{mr^2}}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} = \frac{L^2}{\cancel{I}}\psi;$$

$$\frac{\partial^2\psi(\varphi)}{\partial\varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2}\psi(\varphi) = 0. \qquad (12.4)$$

С подобными уравнениями для функций других переменных мы сталкивались не раз. Решением такого уравнения будет функция:

$$\psi(\varphi) = A\cdot\cos\left(\frac{L}{\hbar}\varphi\right) + B\cdot\sin\left(\frac{L}{\hbar}\varphi\right). \qquad (12.5)$$

Для функции такого вида должно выполняться условие периодичности:

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi). \qquad (12.6)$$

Это условие будет выполняться лишь в том случае, когда аргумент функции является целым числом m, умноженным на угол φ:

$$\frac{L}{\hbar}\varphi = m\varphi.$$

Получается, что момент импульса относительно оси oz одномерного ротатора может принимать лишь дискретные значения:

$$L_z = m\hbar; \qquad (12.7)$$

$$m = 0; \pm1; \pm2; \pm3...$$

Трехмерный ротатор – это частица, движущаяся по поверхности сферы вокруг силового центра. Такой ротатор еще называют *нежестким*. Запишем еще раз для него выражение (12.2):

$$\nabla^2\psi + \frac{m}{I}\frac{L^2}{\hbar^2}\psi = 0. \qquad (12.8)$$

Решением этого уравнения являются так называемые сферические функции $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$, зависящие от двух сферических углов θ и φ. При этом момент импульса принимает дискретные значения:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\cdot\hbar; \qquad (12.9)$$

$$l = 0, 1, 2, 3 \ldots$$

Здесь l – орбитальное квантовое число. Для трехмерного ротатора квантуется не только момент импульса L, но и проекция на любую ось L_z по правилу (12.7).

Очевидно, что проекция вектора не может превосходить длины вектора:

$$L_z \le L; \quad \Rightarrow L_z^2 \le L^2;$$

$$m^2 \cancel{\hbar^2} \le l(l+1)\cancel{\hbar^2};$$

$$m^2 \le l^2 + l.$$

Добавим к правой части 1/2, при этом неравенство станет строгим:

$$m^2 < l^2 + l + \tfrac{1}{4}; \quad \Rightarrow \quad m^2 < \left(l + \tfrac{1}{2}\right)^2; \quad \Rightarrow \quad |m| < \left(l + \tfrac{1}{2}\right);$$

$$|m| \le l. \tag{12.10}$$

Энергия трехмерного ротатора, определяемая выражением (12.1), тоже квантуется. Закон квантования энергии получается подстановкой (12.9) в (12.1):

$$E_\ell = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}; \tag{12.11}$$

$$l = 0, 1, 2, 3 \ldots$$

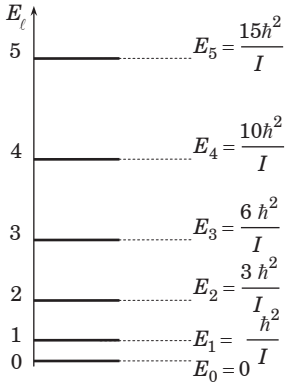

Рис. 12.1. Энергия квантового ротатора

Энергия квантового ротатора зависит от квантового числа l и не зависит от квантового числа m. Значит, уровни энергии, определяемые формулой (12.11), являются вырожденными. То есть каждому из них соответствует $2l+1$ состояние с различными значениями квантового числа m от $-l$ до $+l$.

Уровни энергии трехмерного квантового ротатора приведены на рис. 12.1. Минимальная энергия ротатора при $l = 0$ равна нулю $E_0 = 0$. Энергии возбужденных состояний при других значениях квантового числа l показаны на рис. 12.1.

Видно, что расстояние между соседними энергетическими уровнями растет с увеличением квантового числа l, то есть мы имеем дело с системой разбегающихся уровней. Разность энергий двух соседних уровней равна:

$$\Delta E_l = E_l - E_{l-1} = \frac{l\hbar^2}{I}. \qquad (12.12)$$

С увеличением квантового числа l энергетические уровни квантового ротатора разбегаются.

13. АТОМ ВОДОРОДА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Атом водорода представляет собой систему, состоящую из положительного ядра – протона, имеющего заряд $+e$, и электрона, имеющего заряд $-e$. Масса протона в 1840 раз больше массы электрона, поэтому можно считать, что ядро неподвижно, а электрон вращается вокруг него. Потенциальная энергия взаимодействия электрических зарядов q_1 и q_2, находящихся на расстоянии r друг от друга [6], равна:

$$E_{\Pi} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

где ε_0=8,85·10^{-12} Ф/м – электрическая постоянная в системе СИ.

Потенциальная энергия взаимодействия протона с электроном равна:

$$E_{\Pi} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}. \tag{13.1}$$

Стационарное уравнение Шрёдингера для атома водорода имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + E_{\Pi}\psi = E\psi;$$

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0. \tag{13.2}$$

Поскольку электрон находится в сферически симметричном поле ядра (13.1), решать задачу следует в сферических координатах, показанных на рис. 13.1.

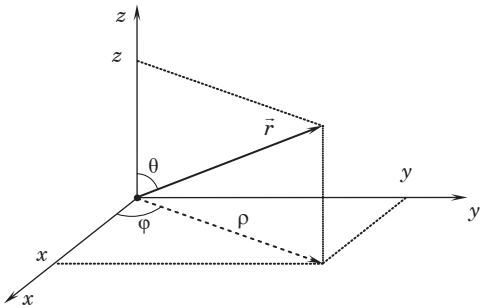

Рис. 13.1. Сферические координаты

$$x = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi,$$
$$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi,$$
$$z = r \cdot \cos\theta. \qquad (13.3)$$

Оператор Лапласа в сферических координатах (13.3) записывается в следующем виде [7]:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Подставляем этот оператор в уравнение (13.2) и домножаем на r^2:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) +$$
$$+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0. \qquad (13.4)$$

Волновую функцию будем искать в виде произведения двух функций:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot Y(\theta,\varphi). \qquad (13.5)$$

Первая из этих функций зависит только от расстояния между зарядами, вторая – только от сферических углов θ и φ. Подставляем волновую функцию вида (13.5) в написанное уравнение (13.4) и делим его на волновую функцию:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial RY}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial RY}{\partial\theta}\right)\right) +$$
$$+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 RY}{\partial\varphi^2} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)RY = 0.$$

$$\frac{\frac{\cancel{Y}\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)}{R\cancel{Y}} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\frac{\cancel{RY}}{\cancel{RY}} +$$
$$+\frac{\frac{\cancel{R}}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)\right)}{\cancel{R}Y} + \frac{\frac{\cancel{R}}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}}{\cancel{R}Y} = 0.$$

Два первых члена последнего уравнения зависят только от расстояния, а два последних – только от углов. Переменные r, θ и φ изменяются независимо друг от друга, поэтому тождественный ноль в правой части уравнения возможен лишь при условии, что два первых слагаемых равны константе Λ, а два последних – той же константе с обратным знаком – Λ.

$$\underbrace{\frac{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)}{R} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)}_{\Lambda} +$$

$$+\underbrace{\frac{\frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)\right)}{Y} + \frac{\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}}{Y}}_{-\Lambda} = 0$$

$$\frac{\left(r^2 R'(r)\right)'}{R} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) = \Lambda; \qquad (13.6)$$

$$\frac{1}{Y\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)\right) + \frac{1}{Y\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + \Lambda = 0 \qquad (13.7)$$

Последнее уравнение написано для электрона, движущегося по поверхности сферы, то есть для *трехмерного квантового ротатора*. Эта задача рассматривалась в п. 12. Решение уравнения (13.7) возможно лишь при:

$$\Lambda = l(l+1), \qquad (13.8)$$

$$l = 0, 1, 2, 3 \ldots$$

Сферические функции $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ параметрически зависят от двух квантовых чисел l и m. При этом момент импульса L и его проекция L_z на произвольную ось oz квантуются, то есть принимают дискретные значения:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\cdot\hbar, \qquad (13.9)$$

где l – орбитальное квантовое число.

$$L_z = m\hbar; \qquad (13.10)$$

$$m = 0; \pm 1; \pm 2; \ldots \pm l,$$

где m – магнитное квантовое число. Смысл этого названия раскроем в следующем параграфе.

Вернемся к уравнению (13.6), внесем параметр $\Lambda = l(l+1)$ в скобки:

$$\frac{\left(r^2 R'(r)\right)'}{R(r)} + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2}\left(E - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) = 0. \qquad (13.11)$$

В этих в скобках оказались три энергии:

E – полная энергия электрона,

$E_l = \dfrac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}$ – кинетическая энергия квантового ротатора;

$E_\Pi = \dfrac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ – потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром.

Решение уравнения (13.11) возможно:

– при любых положительных значениях энергии;

– при дискретных отрицательных значениях энергии равных

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{(n' + l + 1)^2}.$$

$$n' = 0,\ 1,\ 2,\ 3, \ldots$$

Полная энергия электрона зависит от суммы двух квантовых чисел n' и l радиального и орбитального. Эти числа могут принимать значения:

$$n' = 0,\ 1,\ 2,\ 3\ \ldots,\ l = 0,\ 1,\ 2,\ 3\ \ldots$$

Главным квантовым числом n называют сумму:

$$n = n' + l + 1. \qquad (13.12)$$

Главное квантовое число не может равняться нулю и принимает значения:

$$n = 1,\ 2,\ 3,\ 4\ \ldots \qquad (13.13)$$

Полная энергия электрона в атоме водорода определяется только одним – главным квантовым числом n:

$$E = \frac{-m_e e^4}{2\left(4\pi\varepsilon_0\right)^2 \hbar^2 \cdot n^2}. \qquad (13.14)$$

Из выражения (13.12) следует, что $n > l$. Таким образом, орбитальное квантовое число l принимает значения строго меньшие n:

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots n - 1. \qquad (13.15)$$

В спектроскопии и в химии приняты специальные обозначения состояний электрона с различными значениями квантового числа l.

l	Обозначение
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g
5	h

При электронном переходе рождается или поглощается частица – фотон. Она имеет энергию, импульс и момент импульса фотона. Последний равен $\hbar$. Значит, момент импульса электрона при переходе из одного состояния в другое должен обязательно измениться на $\hbar$. При этом орбитальное квантовое число обязательно должно увеличиться или уменьшиться на единицу.

Правило отбора для орбитального квантового числа l:

$$\Delta l = \pm 1. \qquad (13.16)$$

Для главного и магнитного квантовых чисел подобных правил и ограничений нет.

Рассмотрим состояние атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ и орбитальным квантовым числом l=0, то есть в $2s$ – состоянии. Ниже этого уровня энергии есть еще состояние $1s$. Однако правило отбора запрещает переход $2s \rightarrow 1s$, поскольку и в том, и в другом состояниях l=0. Переход вниз с уровня $2s$ невозможен[1],

[1] Невозможен оптический переход с излучением фотона, но возможен безызлучательный переход при столкновении с другим атомом или вынужденный переход при столкновении с другим фотоном.

хотя ниже него есть уровни энергии. Такое состояние атома называется *метастабильным*.

Теперь рассмотрим $2p$ состояние атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ и орбитальным квантовым числом l=1. Из этого состояния в нижерасположенное состояние $1s$ электронный переход с излучением фотона возможен. Правила отбора разрешают переход $2p \rightarrow 1s$, поскольку квантовое число l меняется на 1. В p – состоянии l=1, в s – состоянии l=0.

14. СПИН ЭЛЕКТРОНА

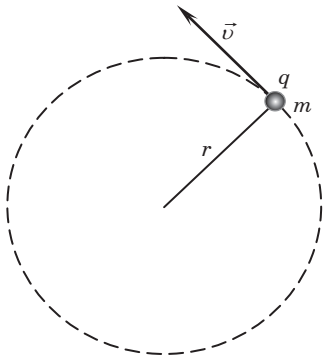

Рис. 14.1. Круговое движение электрического заряда

Рассмотрим частицу массой m с электрическим зарядом q, которая движется по окружности радиусом r с постоянной скоростью υ (рис. 14.1).

Период T обращения частицы равен отношению длины окружности к ее скорости:

$$T = \frac{2\pi r}{\upsilon}.$$

Круговое движение заряда сопровождается протеканием электрического тока по орбите:

$$I = \frac{q}{T} = \frac{q\upsilon}{2\pi r}.$$

Круговой электрический ток создает магнитный момент $P_m = I \cdot S$, где $S = \pi r^2$.

$$P_m = \frac{q\upsilon \cdot \cancel{\pi} r^{\cancel{2}}}{2\cancel{\pi r}} = \frac{q\upsilon r}{2}.$$

Частица, движущаяся по окружности, имеет момент импульса равный:

$$L = m\upsilon r.$$

Отношение магнитного момента к моменту импульса называется *гиромагнитным отношением*:

$$\gamma = \frac{P_m}{L} = \frac{q\upsilon r}{2m\upsilon r} = \frac{q}{2m}.$$

Гиромагнитное отношение для орбитального движения электрона равно

$$\gamma = -\frac{e}{2m_e}. \qquad (14.1)$$

Поскольку электронная оболочка имеет момент импульса $\vec{L}$, она имеет и магнитный момент:

$$\vec{P}_m = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}. \qquad (14.2)$$

Знак «минус» в (14.1), (14.2) указывает на противоположное направление векторов магнитного дипольного момента и орбитального момента импульса электрона.

На магнитный диполь в неоднородном поле действует сила равная произведению величины неоднородности магнитного поля $\partial B/\partial z$ на проекцию магнитного дипольного момента на это направление P_z [6]:

$$F_z = \frac{\partial B}{\partial z} P_z. \tag{14.3}$$

Атом, пролетевший через неоднородное магнитное поле, отклонится на некоторый угол.

Рассмотрим атом с одним валентным электроном. Например, это может быть атом щелочного металла или атом меди, серебра, золота. Момент импульса электронной оболочки такого атома равен моменту импульса одного валентного электрона, поскольку момент импульса заполненной электронной оболочки равен нулю:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar; \;\; l = 0,\ 1,\ 2, \cdots n-1.$$

Магнитный и механический моменты электрона имеют противоположные направления, поскольку заряд электрона отрицательный. Его величина в соответствии с гиромагнитным отношением квантуется:

$$P_m = \frac{e\hbar}{2m_e}\sqrt{l(l+1)} = \mu_B\sqrt{l(l+1)}.$$

В этом выражении $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_e} = 0{,}9274 \cdot 10^{-26}\ \dfrac{\text{Дж}}{\text{Тл}}$ – магнетон Бора.

Проекция момента импульса на направление *oz* внешнего магнитного поля тоже квантуются:

$$L_z = \hbar \cdot m. \tag{14.4}$$

Вместе с ней квантуется проекция магнитного момента на направление внешнего магнитного поля *oz*:

$$P_z = \mu_B m. \tag{14.5}$$

Сила, действующая на атомы в пучке, тоже квантуется:

$$F_z = \frac{\partial B}{\partial z}\mu_B \cdot m. \tag{14.6}$$

В формулах (14.4), (14.5), (14.6) магнитное квантовое число принимает значения:

$$m = 0; \pm 1; \pm 2; \ldots \pm l.$$

В опыте Штерна – Герлаха пучки атомов серебра и лития пропускались через область очень сильной (ощутимой на атомных размерах) неоднородности магнитного поля. Пучок атомов, пролетающих через неоднородное магнитное поле, должен расщепиться на нечетное число компонент – æ=2l+1. Для пучка атомов Ag и Li в s-состоянии расщепления вообще не должно быть, так как при l=0, то есть в s-состоянии, æ=1. Однако в опыте пучок атомов все-таки расщеплялся на две компоненты:

$$æ = 2l + 1 = 2 \Rightarrow l = \frac{1}{2}.$$

Этого не может быть. Орбитальное квантовое число l может принимать только целые значения l=0, 1, 2…

С. Гаудсмит и Д. Уленбек сделали вывод о том, что есть еще одно квантовое число s, задающее вращение электрона и принимающее в опыте Штерна – Герлаха значение $s = {}^1/_2$. Его назвали спиновым. Оно определяет собственный момент импульса частицы, который не связан с орбитальным движением электрона вокруг ядра. Собственный момент импульса – спин[1] S тоже квантуется:

$$S = \sqrt{s(s+1)} \cdot \hbar. \qquad (14.7)$$

Спиновое квантовое число может быть либо полуцелым, либо целым:

– для *фермионов* $s = {}^1/_2, {}^3/_2, {}^5/_2, {}^7/_2, \ldots$ (14.8)

– для *бозонов* s=0, 1, 2, 3, 4, … (14.9)

Электрон относится к так называемым фермионам[2], у него спиновое квантовое число принимает только одно значение $s = {}^1/_2$. Модуль вектора спина для электрона равен:

$$S = \sqrt{\frac{3}{4}} \cdot \hbar.$$

[1] От англ. to spin – вращаться.

[2] К фермионам относятся также протон и нейтрон, имеющие $s = {}^1/_2$. К бозонам относится фотон s=1.

Квантуется также проекция вектора спина на любое выделенное направление oz:

$$S_z = m_s \hbar, \tag{14.10}$$

где m_s – квантовое число, определяющее проекцию спина. Его тоже называют спиновым. Оно принимает значения:

$$-s, -s+1, \ldots s\text{-}1, s.$$

Для электрона возможны лишь два значения:

$$m_s = -\frac{1}{2}, \ +\frac{1}{2}.$$

Проекция спина электрона на выделенное направление S_z принимает значения:

$$S_z = -\frac{1}{2}\hbar, \quad S_z = +\frac{1}{2}\hbar.$$

Сначала считали, что спин связан с вращением частиц вокруг своей оси. Электрон уподоблялся волчку, отсюда и сам термин «вращение».

От этих модельных представлений пришлось отказаться. Для вращающегося шарика гиромагнитное отношение должно определяться формулой (14.1). Однако ряд опытных данных свидетельствует о том, что отношение магнитного момента к механическому для спина вдвое больше, чем для орбитальных моментов. Представление об электроне как о вращающемся шарике оказалось несостоятельным.

Спин следует считать внутренним свойством, присущим ему наряду с зарядом и массой.

15. УРАВНЕНИЕ ДИРАКА. ЧАСТИЦЫ И АНТИЧАСТИЦЫ

Уравнение Шрёдингера не инвариантно относительно преобразований Лоренца; оно справедливо только для нерелятивистских частиц. П. Дирак написал *релятивистское квантовомеханическое уравнение* для электрона. Из этого уравнения естественным образом получается спин.

Спин – это одновременно и квантовомеханическая, и релятивистская величина.

Кроме того, при решении уравнения Дирака получается, что при импульсе p энергия свободного электрона может принимать как положительные, так и отрицательные значения:

$$E = \pm\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}, \qquad (15.1)$$

где c – скорость света в вакууме; m_0 – масса покоя электрона.

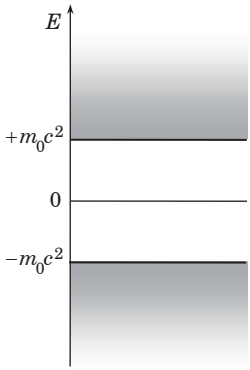

Рис. 15.1. Зоны энергии свободного электрона

На рис. 15.1 видно, что есть две энергетические зоны $E \geq m_0c^2$ и $E \leq -m_0c^2$ с зазором между ними:

$$\Delta E = 2m_0c^2.$$

В релятивистской неквантовой механике получалась аналогичная формула для энергии, в которой рассматривались только положительные значения. Тогда при выводе формулы отрицательные энергии были отброшены, хотя формально они тоже были возможны. Если допустить существование отрицательных энергий, то в неквантовой физике энергия частицы может быть либо только отрицательной, либо только положительной. Переход частицы из одной зоны в другую невозможен, так как должны существовать любые промежуточные значения энергии.

В квантовой механике возможен переход скачком из одной области в другую, поэтому отрицательные энергии тоже допустимы. Частица с отрицательной энергией должна стремиться занять самое нижнее энергетическое состояние, то есть упасть в бесконечно глубокую яму и при этом излучить бесконечно большую по модулю энергию.

Дирак предложил другой выход. По его мнению, переход электрона в состояние с отрицательной энергией не происходит, поскольку все уровни с отрицательными энергиями уже заняты другими электронами. Для электронов – частиц с полуцелым спином действует запрет Паули.

Согласно Дираку

> Состояние, в котором все уровни с отрицательной энергией заняты, а все уровни с положительной энергией свободны, называется вакуумом.

На отрицательных энергетических уровнях находятся электроны, имеющие отрицательные заряды и отрицательные массы. Действительно:

$$E < 0; \quad \Rightarrow \quad mc^2 < 0; \quad \Rightarrow \quad m < 0.$$

Поскольку все без исключения отрицательные энергетические уровни заняты, электроны, находящиеся на них, никак не могут себя обнаружить. Если одному из таких «странных» электронов сообщить энергию $E \geq 2m_0c^2$, то он перейдет в состояние с положительной энергией и будет вести себя как обыкновенный электрон, то есть частица с положительной массой и отрицательным зарядом.

Образовавшаяся в области отрицательных энергий «дырка» будет восприниматься как электрон с положительным зарядом и положительной массой (отсутствие частицы с отрицательной массой воспринимается как частица с положительной массой). Получившаяся частица была названа *позитроном*. Строго говоря, позитрон является *античастицей*, или частицей *антивещества*.

В 1932 году позитрон был обнаружен в космическом излучении. К. Андерсон наблюдал частицу, которая оставляла такой же след, как и электрон, только закрученный в другую сторону.

Рождение электрон-позитронных пар происходит при прохождении γ-фотонов с большой энергией через вещество. Это один из процессов поглощения γ-излучения веществом.

При встрече электрона с позитроном происходит их *аннигиляция*, то есть взаимоуничтожение. При этом в 99 % случаев образуются два гамма-кванта, разлетающихся в противоположных направлениях. В 1 % случаев образуются три гамма-кванта. Почему так происходит, почему не хватает одного гамма-кванта?

Рассмотрим столкновение частицы и античастицы в системе отсчета, связанной с их центром масс. В этой системе объекты сбли-

жаются с одинаковыми скоростями, поэтому их суммарный импульс равен нулю. Гамма-квант, то есть фотон с очень большой энергией, имеет импульс. По закону сохранения импульса должны возникнуть два абсолютно одинаковых фотона и разлететься в противоположные стороны. Полный их импульс при этом будет равен нулю.

В 99 % случаев при сближении электрона и позитрона их спины оказываются направленными в противоположные стороны. Полный спин системы оказывается равным нулю, и аннигиляция протекает так, как это описано выше. В 1 % случаев электрон и позитрон подлетают друг к другу со спинами, ориентированными в одну сторону. Спин каждого из них равен $^1/_2$, полный спин системы равен 1. Спин каждого из образовавшихся фотонов равен 1. Общий спин двух фотонов может быть равен либо 0, либо 2. По закону сохранения момента импульса должны возникнуть три фотона, два из них должны иметь спины, направленные в ту же сторону, что и суммарный спин двух электронов, и один – в противоположную. Закон сохранения импульса при этом выполняется столь же просто, как и для двух фотонов.

На явлении аннигиляции электрона и позитрона с образованием двух гамма-фотонов основана работа протонно-эмиссионного томографа – ПЭТ[1]. Больному вводят в кровь β^+ активный изотоп (вещество, которое самопроизвольно излучает позитроны). Каждый образовавшийся позитрон тут же аннигилирует с оказавшимся рядом электроном. Образуются два гамма-фотона, разлетающихся под углом 180°, которые регистрируются внешними детекторами. Линия, вдоль которой разлетаются эти фотоны, называется линией совпадения, на ней вычисляется место аннигиляции. Полученные данные позволяют построить трехмерную карту интенсивности радиоактивного распада.

Описываемый метод регистрирует интенсивность тока крови, то есть обмена веществ. Чем больше радиоактивного препарата захватывается тканями, тем «горячее» они выглядят на изображении. Обмен веществ в злокачественной опухоли протекает много интенсивнее, чем в здоровых тканях, поэтому злокачественные опухоли дают «очень горячую» картинку.

[1] Не путайте с магнитно-резонансным томографом (МРТ).

16. КВАНТОВАЯ СИСТЕМА ТОЖДЕСТВЕННЫХ ЧАСТИЦ

В классической механике иногда встречаются неразличимые частицы. Например, в русском бильярде после начального удара по пирамиде трудно понять, какой шар с каким столкнулся, какой и где в итоге окажется. Это затруднение связано именно с неразличимостью шаров. Проблема частично снимается, если на шарах имеются номера. В этом случае проясняются начальные и конечные положения каждого шара, но не до конца отслеживаются все столкновения, которые имели место. Полная ясность появляется только после просмотра замедленного повтора.

В классической физике неразличимость частиц ведет к сложности наблюдений, но не к принципиальной невозможности проводить такие наблюдения.

Пусть две классические неразличимые частицы столкнулись и разлетелись в направлениях, показанных на рис. 16.1. Какое из двух столкновений А или Б в действительности произошло? Конечное состояние в обоих случаях одинаковое. Мы не знаем, как в действительности протекало столкновение только потому, что не внимательно наблюдали. Абсолютно точно известно, что мог произойти только один из показанных процессов, причем любой.

В квантовой механике ситуация принципиально иная. Если могли произойти два процесса А и Б, значит, они сразу оба и произошли. Волновые функции частиц в конечном состоянии оказались перемешанными. Обе частицы после столкновения полетели сразу в двух направлениях. Можно говорить лишь о вероятности того, что произошел процесс А или процесс Б.

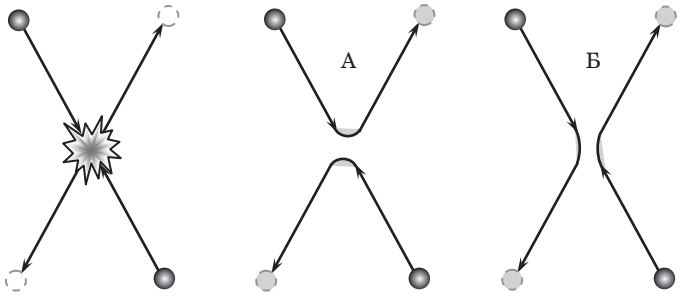

Рис. 16.1. Столкновение тождественных частиц

Квантовая система тождественных частиц описывается *многочастичной волновой функцией*. Она зависит от координат и спинов каждой частицы, а также от времени:

$$\Psi = \Psi\left(x_1, y_1, z_1, s_1,\ x_2, y_2, z_2, s_2,\ x_3, y_3, z_3, s_3,\ \ldots\ x_N, y_N, z_N, s_N, t\right). \quad (16.1)$$

Волновая функция представляется в виде произведения координатной и волновой частей:

$$\Psi = \psi \cdot e^{-i\omega t} \quad (16.2)$$

Координатная волновая функция зависит от координат и спинов всех частиц:

$$\psi = \psi\left(x_1, y_1, z_1, s_1,\ x_2, y_2, z_2, s_2,\ x_3, y_3, z_3, s_3,\ \ldots\ x_N, y_N, z_N, s_N\right). \quad (16.3)$$

Многочастичная волновая функция обладает рядом свойств. Первые шесть из них подобны свойствам одночастичной волновой функции, перечисленным в п. 5. Комментарии нужны только к пятому и шестому свойствам.

Свойства многочастичной волновой функции:

1) однозначность;

2) конечность;

3) непрерывность функции по всем переменным;

4) непрерывность первой производной функции по любой переменной;

5) условие нормировки.

Это условие вытекает из статистического смысла волновой функции. Вероятность $d^N W$ обнаружения первой частицы в элементе объема dV_1, второй – в dV_2, третьей – в dV_3 и т. д., последней – в dV_N равна:

$$d^N W = |\Psi|^2\, dV_1 dV_2 dV_3 \cdots dV_N = \Psi\Psi^* dV_1 dV_2 dV_3 \cdots dV_N. \quad (16.4)$$

Вероятность обнаружить частицы во всем пространстве равна единице:

$$\int\limits_{(V)} |\Psi|^2 dV_1 dV_2 dV_3 \cdots dV_N = \int\limits_{(V)} \Psi\Psi^* dV_1 dV_2 dV_3 \cdots dV_N = 1. \quad (16.5)$$

Звездочка в этих формулах обозначает знак комплексного сопряжения.

Условия (16.4), (16.5) точно так же, как и в п. 5, формулируются для координатных частей волновых функций ψ.

Волновая функция получается при решении уравнения Шрёдингера. В гамильтониане присутствует сумма операторов Лапласа для каждой частицы. Потенциальная энергия системы частиц – это, во-первых, сумма потенциальных энергий каждой частицы во внешнем поле; во-вторых, сумма потенциальных энергий взаимодействия каждой частицы с каждой; в-третьих, если присутствуют многочастичные взаимодействия, то должна быть добавлена соответствующая энергия.

Кроме шести названных свойств у многочастичной волновой функции есть еще одно специфическое очень важное свойство – *перестановочная симметрия*.

Если две тождественные частицы поменять местами, то вероятность такого состояния не изменится, то есть модуль волновой функции[1] не изменится:

$$\psi' = \psi \cdot e^{i\alpha}.$$

Здесь $e^{i\alpha}$ – фазовый множитель, не меняющий модуля комплексного числа.

Если повторить ту же самую операцию еще раз, то волновую функцию придется еще раз домножить на этот множитель:

$$\psi'' = \psi' \cdot e^{i\alpha} = \psi \cdot e^{2i\alpha}.$$

Очевидно, что после двух перестановок система вернулась в исходное состояние, то есть:

$$\psi'' = \psi; \;\; e^{2i\alpha} = 1; \quad \Rightarrow \quad e^{i\alpha} = \pm 1.$$

При перестановке местами двух тождественных частиц волновая функция либо не меняется, либо меняет знак:

$$\psi' = \psi \tag{16.6}$$

$$\psi' = -\psi \tag{16.7}$$

По отношению к этой операции волновая функция может быть либо симметричной (16.6), либо антисимметричной (16.7).

Принцип Паули

Система тождественных квантовых частиц с целым спином описывается симметричной волновой функцией.

[1] Сказанное относится как к самой волновой функции Ψ, так и к ее координатной части ψ.

Система тождественных квантовых частиц с полуцелым спином описывается антисимметричной волновой функцией.

Рассмотрим систему квантовых тождественных частиц с полуцелыми спинами, в которой две частицы находятся в тождественных состояниях, то есть имеют одинаковый набор квантовых чисел. Переставим эти две частицы местами. При этом волновая функция обязана поменять знак (16.7):

$$\psi' = -\psi.$$

С другой стороны, частицы тождественные, состояния тождественные. Перестановка местами таких частиц вообще ничего не меняет[1]. Волновая функция должна остаться такой, какой была:

$$\psi' = \psi.$$

То и другое вместе возможно лишь для $\psi = 0$. Значит, вероятность такого состояния системы равна нулю. Это состояние запрещено принципом Паули.

Следствие из принципа Паули

Никакие две тождественные квантовые частицы с полуцелым спином не могут находиться в одинаковых состояниях, то есть иметь одинаковый набор квантовых чисел.

Электрон имеет спиновое квантовое число s=1/2. Полученное следствие часто называют *Принципом Паули для электрона*.

Рассмотрим две тождественные квантовые частицы, состояния которых описываются волновыми функциями $\psi_1(\vec{r}_1,\vec{s}_1)$ и $\psi_2(\vec{r}_2,\vec{s}_2)$. Состояние системы этих двух частиц описывается, либо симметричной $\psi_c(\vec{r}_1,\vec{s}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_2)$, либо антисимметричной $\psi_{ac}(\vec{r}_1,\vec{s}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_2)$ волновой функцией:

$$\psi_c(\vec{r}_1,\vec{s}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_1(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2,\vec{s}_2) + \psi_1(\vec{r}_2,\vec{s}_2)\cdot\psi_2(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\right\}, \quad (16.8)$$

$$\psi_{ac}(\vec{r}_1,\vec{s}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_1(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2,\vec{s}_2) - \psi_1(\vec{r}_2,\vec{s}_2)\cdot\psi_2(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\right\}. \quad (16.9)$$

Убедимся в том, что функция (16.8) действительно симметричная, а (16.9) – действительно антисимметричная. Для этого поме-

[1] В рассуждениях, приведших к (16.7), мы рассматривали тождественные частицы в разных состояниях.

няем подстрочные индексы у самих функций (16.8), (16.9) и у аргументов этих функций. Для симметричной функции (16.8) ничего не изменится:

$$\psi'_c(\vec{r}_2,\vec{s}_2,\vec{r}_1,\vec{s}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_1(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2,\vec{s}_2) + \psi_1(\vec{r}_2,\vec{s}_2)\cdot\psi_2(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\right\} =$$
$$= \psi_c(\vec{r}_1,\vec{s}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_2).$$

Антисимметричная функция (16.9) поменяет знак:

$$\psi'_{ac}(\vec{r}_2,\vec{s}_2,\vec{r}_1,\vec{s}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_1(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2,\vec{s}_2) - \psi_1(\vec{r}_2,\vec{s}_2)\cdot\psi_2(\vec{r}_1,\vec{s}_1)\right\} =$$
$$= -\psi_{ac}(\vec{r}_1,\vec{s}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_2).$$

Таким образом, функция (16.8) действительно симметричная, а функция (16.9) – антисимметричная при перестановке местами частиц 1 и 2. Многочастичные функции строятся из одночастичных аналогичным способом.

17. ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК

Состояние электрона в атоме задается четырьмя квантовыми числами.

– Главное квантовое число n определяет энергию электрона. Оно принимает целые положительные значения.

Все электроны, имеющие одинаковое значение главного квантового числа, образуют *электронный слой*. Слои принято называть большими буквами латинского алфавита:

n	=	1,	2,	3,	4,	…
		K	L	M	N	

• Орбитальное квантовое число l определяет момент импульса орбитального движения и энергию[1] электрона. Оно принимает целые значения от 0 до n–1.

Все электроны, имеющие одинаковые значения главного и орбитального квантовых чисел, образуют *электронную оболочку*. В спектроскопии и в химии приняты специальные обозначения электронных оболочек с различными значениями квантового числа l:

l	=	0,	1,	2,	3,	4,	5,	···	n–1
		s	p	d	f	g	h		

• Магнитное квантовое число m определяет проекцию орбитального момента импульса электрона на физически выделенное направление. Оно принимает целые значения от – l до l:

$$m = -l, \cdots, -2, -1, 0, +1, +2, \cdots, +l.$$

Три квантовых числа n, l, m задают *состояние электрона*.

В электронной оболочке с квантовым числом l существует $2l+1$ состояние.

– Спиновое квантовое число m_s задает проекцию спина электрона на физически выделенное направление. Оно принимает значения:

$$m_s = -\frac{1}{2}, \ +\frac{1}{2}.$$

[1] Для всех атомов, кроме водорода.

В каждом электронном состоянии могут находиться два электрона с противоположно ориентированными спинами.

В электронной оболочке могут находиться æ=2(2l+1) электронов.

Вычислим количество электронов в заполненном электронном слое:

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

На рис. 17.1 показаны все возможные проекции вектора орбитального момента на ось oz в d-состоянии (l=2). Длина вектора орбитального момента в этом состоянии равна:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \cdot \hbar = \sqrt{2(2+1)} \cdot \hbar = \sqrt{6} \cdot \hbar.$$

На рис. 17.1 изображена окружность[1] с радиусом $\hbar\sqrt{6}$. Стрелочка L должна обязательно заканчиваться на этой окружности. Проекция этого вектора на ось oz может принимать пять значений:

$$L_z = -2\hbar; \quad -\hbar; \quad 0; \quad +\hbar; \quad +2\hbar.$$

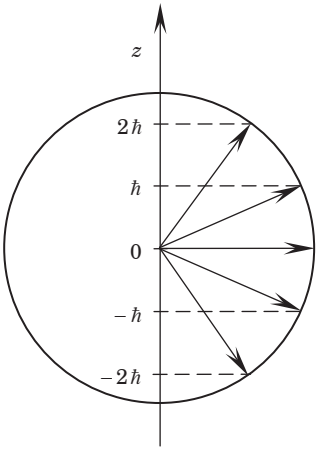

Рис. 17.1. Проекции вектора орбитального момента электрона в d-состоянии на ось oz

Все они показаны на рисунке. На самом деле картинка, приведенная на рисунке, трехмерная. Эти пять стрелок-векторов находятся в разных плоскостях. Вся конструкция напоминает «морского ежа». Если вся электронная оболочка атома заполнена, то сумма всех проекций на эту ось равна нулю. Поскольку направление выбранной оси oz произвольное, проекция орбитального момента электрона на произвольное направление равна нулю. Это обозначает, что момент импульса заполненной электронной оболочки равен нулю.

Заполнение электронных состояний происходит не слой за слоем. Есть несколько эмпирических правил В. Клечковского для заполнения электронных оболочек:

1) сначала заполняются состояния с наименьшей энергией;

[1] На самом деле сфера.

2) из двух состояний меньшую энергию имеет то, в котором сумма квантовых чисел $n+l$ меньше;

3) из состояний с одинаковой суммой квантовых чисел $n+l$ меньшую энергию имеет то, в котором квантовой число n меньше.

Ниже приведена таблица, построенная в соответствии с этими правилами. Она прерывается комментариями и продолжается после них.

Поскольку $n > l$, суммы $n+l=1$ и $n+l=2$ можно составить единственным способом. Возможны только s-состояния. Число электронов в заполненной s-оболочке:

$$æ_s=2(2l+1)=2(2\cdot 0+1)=2.$$

$n+l$	n, l	Электронный паспорт
1	$1s$	$1s^2$
2	$2s$	$1s^2 2s^2$

Сумму $n+l=3$ можно получить двумя способами: 3=2 + 1 и 3=3 + 0. Возможны $2p$- и $3s$-состояния. Число электронов в заполненной p-оболочке:

$$æ_p=2(2l+1)=2(2\cdot 1+1)=6.$$

В заполненной s-оболочке всегда 2 электрона. В соответствии с правилами, приведенными выше, сначала заполняется $2p$-оболочка, а потом $3s$.

Рассуждаем аналогично: сумме $n+l=4$ отвечают два состояния $3p$ и $4s$. Сначала заполняется $3p$-оболочка, а потом $4s$.

$n+l$	n, l	Электронный паспорт
3	$2p$	$1s^2 2s^2 2p^6$
	$3s$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
4	$3p$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
	$4s$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Сумму $n+l=5$ можно получить тремя способами: $5=3+2$, 5=4 + 1 и 5=5 + 0. Возможны $3d$-, $4p$- и $5s$-состояния. Число электронов в заполненной d-оболочке:

$$æ_d=2(2l+1)=2(2\cdot 2+1)=10.$$

В заполненной p-оболочке всегда 6 электронов, в заполненной s-оболочке всегда 2 электрона. В соответствии с правилами, приве-

денными выше, сначала заполняется 3*d*-оболочка, потом 4*p*, а потом 5*s*.

Рассуждаем аналогично: сумме $n + l = 6$ отвечают три состояния 4*d*, 5*p*, 6*s*. Сначала заполняется 4*d*-оболочка, потом 5*p*, а потом 6*s*.

$n + l$	n, l	Электронный паспорт
5	3 *d*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10}$
	4 *p*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$
	5 *s*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2$
6	4 *d*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10}$
	5 *p*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6$
	6 *s*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2$

Сумму $n + l = 7$ можно получить четырьмя способами: 7=4 + 3, 7=5 + 2, 7=6 + 1 и 7=7 + 0. Возможны 4*f*-, 5*d*-, 6*p*- и 7*s*-состояния. Число электронов в заполненной *f*-оболочке:

$$æ_f = 2(2l+1) = 2(2 \cdot 3+1) = 14.$$

В заполненной *d*-оболочке 10 электронов, в заполненной *p*-оболочке 6 электронов, в заполненной *s*-оболочке 2 электрона. В соответствии с правилами, приведенными выше, сначала заполняется 4*f*-оболочка, потом 5*d*, потом 6*p*, а потом 7*s*.

Рассуждаем аналогично: сумме $n + l = 8$ отвечают четыре состояния 5*f*, 6*d*, 7*p*, 8*s*. Сначала заполняется 5*f*-оболочка, потом 6*d*, потом 7*p*, а потом 8*s*.

$n + l$	n, l	Электронный паспорт
7	4 *f*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14}$
	5 *d*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10}$
	6 *p*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6$
	7 *s*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2$
8	5 *f*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14}$
	6 *d*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^{10}$
	7 *p*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6$
	8 *s*	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10} 6p^6 7s^2 5f^{14} 6d^{10} 7p^6 8s^2$

Эмпирические правила Клечковского объяснили основные закономерности заполнения электронных оболочек атомов, находящихся в основном состоянии, и построения периодической таблицы химических элементов Д. Менделеева. Заполнение *d*-оболочек соответствует образованию побочной подгруппы. Заполнение *f*-оболочек соответствует группам лантаноидов и актиноидов в таблице Менделеева.

18. СПОНТАННЫЕ И ВЫНУЖДЕННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Рассмотрим квантовую систему, в которой имеются два энергетических уровня, между которыми разрешен оптический переход[1]. Энергетические уровни и возможные переходы между ними показаны на рис. 18.1.

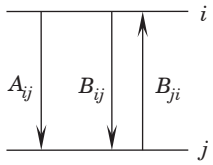

Рис. 18.1. Переходы между уровнями

Количество *спонтанных,* то есть самопроизвольных, переходов с уровня i на уровень j пропорционально количеству атомов, находящихся в состоянии i, и промежутку времени наблюдения dt:

$$dN_{ij}^{\text{спонт}} = N_i A_{ij} dt.$$

Коэффициент пропорциональности называется коэффициентом Эйнштейна A_{ij}. Кроме спонтанных переходов имеются переходы, спровоцированные пролетающими мимо фотонами. Такие переходы называются *индуцированными,* или *вынужденными*.

Фотон, испущенный спонтанно, вылетает в любом направлении, с любой поляризацией и с любой начальной фазой. Направление вылета, поляризация и начальная фаза индуцированного фотона определяются пролетающим мимо фотоном. Вылетевший фотон пристраивается «в хвост» к пролетающему мимо фотону. Образуется целая вереница, или «цуг»[2], из фотонов. Число вынужденных переходов пропорционально числу атомов, находящихся в состоянии i, времени наблюдения dt, и количеству пролетающих мимо фотонов с частотой ω_{ij}, то есть спектральной плотности энергии $u(\omega)$[3]:

$$dN_{ij}^{\text{вын}} = N_i B_{ij} u(\omega) dt.$$

Коэффициент пропорциональности называется коэффициентом Эйнштейна B_{ij}.

Спонтанные переходы с нижнего уровня на верхний невозможны. Все переходы происходят с поглощением фотона; все они вынужденные. Количество переходов с уровня j на уровень i пропорционально числу атомов, находящихся в состоянии j, промежутку

[1] Электронный переход с излучением фотона.
[2] В переводе с немецкого языка zug – поезд.
[3] Эта величина введена в [4]. Формула (21.10).

времени наблюдения dt, и количеству пролетающих мимо фотонов с частотой ω_{ji}, то есть спектральной плотности энергии $u(\omega)$:

$$dN_{ji} = N_j B_{ji} u(\omega) dt.$$

Коэффициент пропорциональности называется коэффициентом Эйнштейна B_{ji}. Все переходы снизу вверх являются вынужденными. В состоянии термодинамического равновесия полное число переходов снизу вверх должно равняться числу переходов сверху вниз:

$$dN_{ij}^{\text{спонт}} + dN_{ij}^{\text{вын}} = dN_{ji}; \quad N_i A_{ij} dt + N_i B_{ij} u(\omega) dt = N_j B_{ji} u(\omega) dt.$$

Выразим спектральную плотность энергии из этой формулы:

$$u(\omega) = \frac{N_i A_{ij}}{N_j B_{ji} - N_i B_{ij}}.$$

В состоянии равновесия заселенности уровней связаны распределением Больцмана:

$$\frac{N_j}{N_i} = e^{\frac{E_i - E_j}{kT}}; \qquad \Rightarrow \qquad \frac{N_j}{N_i} = e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}.$$

Здесь T – абсолютная температура; k – постоянная Больцмана. Продолжим:

$$u(\omega) = \frac{\cancel{N_i} A_{ij}}{\cancel{N_i} B_{ji} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - \cancel{N_i} B_{ij}};$$

$$u(\omega) = \frac{A_{ij}}{B_{ji} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - B_{ij}}. \tag{18.1}$$

При $T \to \infty$, $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \to 1$, знаменатель в формуле (18.1) будет равен $B_{ji} - B_{ij}$. Спектральная плотность энергии в этом случае стремится к бесконечности. Это возможно лишь при:

$$B_{ji} = B_{ij}; \tag{18.2}$$

$$u(\omega) = \frac{A_{ij}}{B_{ij}} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \tag{18.3}$$

Приведенные математические выкладки были сделаны А. Эйнштейном в то время, когда распределение Планка принималось не всеми учеными. Поэтому Эйнштейн опирался на формулу Релея – Джинса, которая совершенно точно справедлива для малых частот при высоких температурах. Раскладываем экспоненту в ряд, ограничиваемся двумя членами разложения:

$$u(\omega) = \frac{A_{ij}}{B_{ij}} \cdot \frac{1}{1 + \hbar\omega/kT + \ldots - 1} = \frac{A_{ij}}{B_{ij}} \cdot \frac{kT}{\hbar\omega}.$$

Приравниваем получившееся выражение и формулу (23.10) в [4]:

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} \cdot \frac{\cancel{kT}}{\hbar\omega} = \frac{\omega^2 \cancel{kT}}{\pi^2 c^3};$$

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \qquad (18.4)$$

Получившаяся формула указывает на то, что при высоких частотах преобладают спонтанные переходы, а при низких – вынужденные.

Отношение коэффициентов Эйнштейна A_{ij}/B_{ij} подставляем в (18.3):

$$u(\omega, T) = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \qquad (18.5)$$

и получаем еще один альтернативный вывод распределения Планка для теплового излучения.

19. ПРИНЦИП РАБОТЫ ЛАЗЕРА

Лазер – это оптический квантовый генератор[1], преобразующий энергию накачки (световую, электрическую, химическую и др.) в энергию монохроматического узконаправленного излучения[2]. Работа лазера основана на квантовомеханическом явлении усиления *вынужденного* излучения.

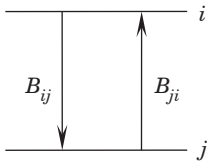

Рис. 19.1. Двухуровневая схема

Рассмотрим *двухуровневую схему* (рис. 19.1). В системе имеются два уровня энергии i и j, между которыми разрешены оптические переходы. Если в такой системе пролетает фотон с энергией $\varepsilon = E_i - E_j$, то он может вызвать переходы как с верхнего уровня на нижний $i \to j$, так и с нижнего уровня на верхний $j \to i$. В первом случае происходит излучение, а во втором – поглощение света.

Число вынужденных переходов в единицу времени с излучением света равно:

$$\frac{dN_{ij}^{вын}}{dt} = N_i B_{ij} u(\omega).$$

Число вынужденных переходов в единицу времени с поглощением света равно:

$$\frac{dN_{ji}^{вын}}{dt} = N_j B_{ji} u(\omega).$$

Вычтем из верхнего выражения нижнее и получим баланс переходов в рассматриваемой системе во внешнем электромагнитном поле:

$$\frac{dN}{dt} = N_i B_{ij} u(\omega) - N_j B_{ji} u(\omega)$$

Коэффициенты Эйнштейна для вынужденных переходов равны друг другу:

$$B_{ji} = B_{ij},$$

[1] Название «лазер» (англ. Laser) – это сокращение от light amplification by stimulated emission of radiation. По-русски – это усиление света при помощи вынужденного излучения.

[2] Очень часто это излучение получается еще и поляризованным.

$$\frac{dN}{dt} = \left(N_i - N_j\right) B_{ij} u(\omega). \qquad (19.1)$$

Оптический квантовый генератор будет работать при условии $dN/dt > 0$. В противном случае при $dN/dt < 0$, среда поглощает свет, генерации нет.

Для возникновения генерации необходима *инверсная заселенность* энергетических уровней. Заселенность верхнего уровня должна быть больше заселенности нижнего уровня.

В состоянии термодинамического равновесия заселенности энергетических уровней подчиняются распределению Больцмана:

$$\frac{N_i}{N_j} = e^{-\left(\frac{E_i - E_j}{kT}\right)}. \qquad (19.2)$$

В состоянии равновесия инверсная заселенность энергетических уровней невозможна. Если производить оптическую накачку, то есть освещать систему излучением со сплошным спектром, то заселенность верхнего уровня будет увеличиваться, но она никогда не станет инверсной. По мере увеличения заселенности верхнего уровня эффективность накачки будет уменьшаться. Чем меньше разность $N_j - N_i$, тем меньше dN/dt. При $N_j = N_i$ число фотонов в системе не меняется; каждый пролетающий фотон вызывает с равной вероятностью как индуцированное излучение, так и поглощение. Дальнейшая накачка не приведет ни к увеличению, ни к уменьшению заселенности верхнего уровня.

При помощи накачки можно создать заселенность уровней большую, чем согласно распределению Больцмана, но создать инверсную заселенность не получится. Двухуровневая схема не может обеспечить работу оптического квантового генератора.

Рассмотрим *трехуровневую схему*. В системе имеются три уровня энергии i, j, k (рис. 19.2). Между уровнями i и j разрешены оптические переходы. Переходы между уровнями k и j запрещены. Уровень k метастабильный. С уровня i на уровень k возможны безызлучательные столкновительные переходы[1].

[1] При таких переходах фотон не излучается. Внутренняя энергия возбужденного состояния превращается в кинетическую энергию сталкивающихся атомов.

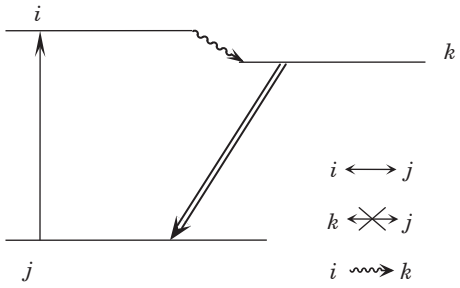

Рис. 19.2. Трехуровневая схема

При помощи накачки заселяют энергетический уровень i. При столкновениях без оптических переходов активно заполняется уровень k. Переходы вниз на уровень j невозможны. На уровне k скапливается большое количество атомов. Заселенность уровня k оказывается больше чем заселенность уровня j:

$$N_k > N_i.$$

Создаются условия для генерации вынужденного излучения с уровня k на уровень j. Возможна ли генерация? Ведь переход между этими уровнями запрещен?

Во-первых, запрет перехода не обозначает, что таких переходов вообще не происходит. Они возможны, но их вероятность на несколько порядков меньше. Единичные спонтанные переходы между уровнями k и j время от времени все-таки происходят:

Во-вторых, запрет касается спонтанных, а не вынужденных переходов. Дело в том, что при спонтанном переходе происходит взаимодействие двух частиц: электрона и испущенного фотона. При вынужденном переходе происходит взаимодействие трех частиц: электрона, пролетающего мимо фотона и испущенного фотона. Поэтому правила отбора для вынужденных и спонтанных переходов разные.

Единичный фотон, спонтанно испущенный с уровня k на уровень j, вызовет генерацию вынужденного излучения, то есть запускает квантовый генератор. При генерации заселенность уровня k резко уменьшается, а заселенность уровня j увеличивается, что приводит либо к уменьшению мощности излучения, либо к прекращению генерации. Оптические квантовые генераторы на трехуровневой схеме либо маломощные, либо работают в импульсном режиме.

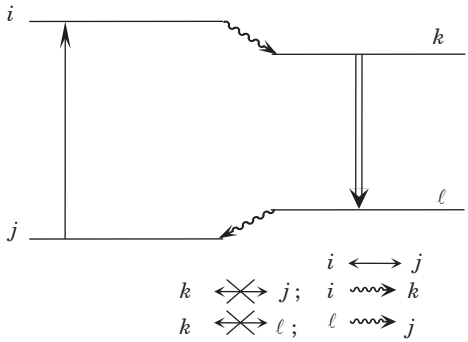

Рис. 19.3. Четырехуровневая схема

От названных недостатков свободна *четырехуровневая схема*. Разрешенные, запрещенные и столкновительные переходы в этой схеме показаны на рис. 19.3.

При помощи накачки электроны загоняются с уровня j на уровень i. Активно идущие столкновительные переходы заполняют уровень k и создают на нем инверсную заселенность:

$$N_k > N_l \text{ и } N_k > N_j.$$

Возникает генерация с уровня k на уровень l. При этом активно идущие столкновительные переходы освобождают уровень l. Инверсная заселенность уровня k относительно уровня l сохраняется. Так работает четырехуровневая схема[1].

[1] Иногда возникает генерация между уровнями k и j, то есть кроме четырехуровневой работает трехуровневая схема.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

20. КЛАССИЧЕСКАЯ СТАТИСТИКА И КВАНТОВЫЕ СТАТИСТИКИ

Статистика – это раздел физики, изучающий системы, состоящие из огромного числа частиц, подчиняющихся законам классической или квантовой механики. В классической физике нас будет интересовать функция, задающая среднюю наполненность выбранного интервала энергии. В квантовой физике – функции, задающие среднюю заселенность энергетического уровня.

В случае классических частиц справедливо распределение Больцмана – Максвелла:

$$N = N_0 e^{-\frac{E}{kT}}.$$

В этой формуле E – полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия частицы; N – количество частиц, имеющих такую энергию; N_0 – количество частиц, имеющих минимальную энергию; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Введем среднюю относительную заселенность интервала энергии:

$$\langle n \rangle = \frac{N}{N_0} = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}}}.$$

До сих пор рассматривались только системы с постоянным числом частиц, в которых не могут протекать химические реакции. Предположим, что в системе могут появляться новые частицы. Энергия, затрачиваемая системой для рождения новой частицы, называется *химическим потенциалом* и обозначается символом μ. Энергия частиц не может быть меньше μ. Средняя относительная заселенность интервала энергии равна:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}}}. \qquad (20.1)$$

Формула (20.1) называется *классической статистикой Максвелла – Больцмана*.

Поведение квантовых частиц отличается от поведения классических частиц. Различают два типа квантовых частиц:

– с полуцелыми спинами $s = 1/2, 3/2 \ldots$,

– с целыми спинами s=0, 1, 2…

Для частиц с полуцелыми спинами действует запрет Паули. В каждом состоянии может находиться только одна частица (или ни одной). Для таких объектов справедлива статистика *Ферми – Дирака*. Сами частицы называются *фермионами*. Среднее число n_i заполнения уровня i в состоянии с энергией E_i равно:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1}. \qquad (20.2)$$

В этой формуле E_F – энергия Ферми. Если энергия частицы равна этому значению – E_i=E_F, то средняя заселенность уровня равна $1/2$.

В общем случае энергия частицы может быть как больше, так и меньше энергии Ферми:

$$E_i \gtrless E_F$$

Для частиц с целыми спинами нет запрета Паули. В каждом состоянии может находиться любое число частиц. Для таких объектов справедлива статистика *Бозе – Эйнштейна*. Сами частицы называются *бозонами*. Среднее число n_i заполнения уровня i в состоянии с энергией E_i равно:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} - 1}. \qquad (20.3)$$

В этой формуле E_F – энергия Ферми. Для бозонов этот параметр не может быть положительным. В противном случае средние числа заполнения уровня оказались бы отрицательными, чего не может быть никогда.

Для системы с постоянным числом Бозе-частиц $E_F < 0$.

Для системы с непостоянным числом Бозе-частиц E_F=0.

В последнем случае статистика Бозе – Эйнштейна упрощается:

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_i}{kT}} - 1}. \qquad (20.4)$$

При $E >> kT$ формулы (20.2), (20.3), (20.4) превращаются в классическую статистику Максвелла – Больцмана.

21. ФОТОННЫЙ ГАЗ

Мельчайшие частицы света – фотоны практически не сталкиваются друг с другом[1]. Они не могут поменять свою скорость, которая всегда равна скорости света в вакууме. Из сказанного вытекает, что фотоны не могут образовывать «молекул», фотонный газ не может конденсироваться. И этим он похож на идеальный газ.

Рассмотрим замкнутую полость, заполненную светом, показанную на рис. 21.1. Бегущих волн в замкнутом пространстве быть не может, поэтому в полости возникают только стоячие электромагнитные волны. От формы полости, конечно же, ничего не зависит, поэтому мы выбрали ее в форме прямоугольного параллелепипеда с ребрами, направленными вдоль координатных осей.

Для того чтобы в полости установилась стоячая электромагнитная волна, нужно, чтобы на длине ребра ℓ_1 укладывалось целое число n_1 полуволн. То же самое относится к ребрам ℓ_2 и ℓ_3:

$$\ell_1 = n_1 \cdot \frac{\lambda}{2}, \qquad \ell_2 = n_2 \cdot \frac{\lambda}{2}, \qquad \ell_3 = n_3 \cdot \frac{\lambda}{2}. \tag{21.1}$$

Вспомним, что *волновое число* к равно $\kappa = 2\pi/\lambda$. *Волновым вектором* называется тот, который имеет направление скорости волны и модуль равный волновому числу. Из формул (21.1) следуют выражения для проекций волнового вектора на координатные оси:

$$\kappa_x = \frac{\pi n_1}{\ell_1}, \qquad \kappa_y = \frac{\pi n_2}{\ell_2}, \qquad \kappa_z = \frac{\pi n_3}{\ell_3}. \tag{21.2}$$

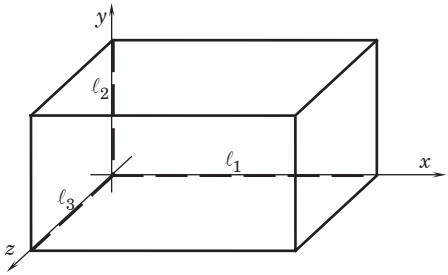

Рис. 21.1. Полость в форме параллелепипеда

[1] Взаимодействие фотонов возможно лишь в лазерном излучении.

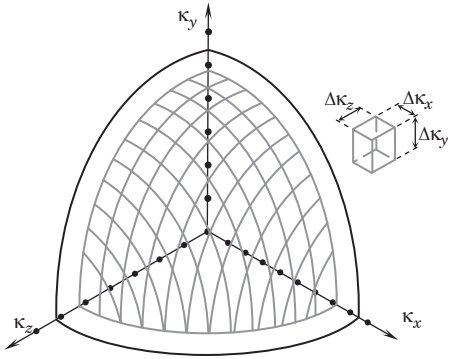

Рис. 21.2. Компоненты волнового вектора в к-пространстве

Проекции волнового вектора на координатные оси принимают дискретные значения, то есть квантуются:

$$\Delta\kappa_x = \frac{\pi}{\ell_1}, \qquad \Delta\kappa_y = \frac{\pi}{\ell_2}, \qquad \Delta\kappa_z = \frac{\pi}{\ell_3}. \tag{21.3}$$

Перейдем к пространству волновых векторов. В нем вдоль координатных осей откладываются числа κ_x, κ_y, κ_z. На рис. 21.2 точками отмечены значения, которые могут принимать эти числа. Разумеется, такие точки надо откладывать не только по осям, но и во всем к-пространстве.

Элементарная ячейка в таком пространстве с размерами $\Delta\kappa_x$, $\Delta\kappa_y$, $\Delta\kappa_z$ показана на рисунке. Все к-пространство заполнено такими ячейками. Если поместить ее в произвольном месте к-пространства, то в ней всегда окажется ровно одна точка.

Каждой точке в к-пространстве соответствуют два волновых вектора со взаимно перпендикулярными поляризациями. Найдем количество волн, имеющих волновое число в интервале от к до к+dк. Для этого нужно сосчитать число точек, попавших в зазор между сферами с радиусами к и к+dк. Вычислим объем сферического зазора, полагая его дифференциально малым:

$$dV = S_{\text{сферы}} d\kappa = 4\pi\kappa^2 d\kappa.$$

Поделим этот объем на объем элементарной ячейки. Выше было показано (21.2), что проекции волнового вектора κ_x, κ_y, κ_z не могут быть отрицательными, поэтому мы рассматриваем только 1/8

часть к-пространства. Найдем число волн с длиной волнового вектора от к до к+dк:

$$dN_{\kappa} = \frac{2}{8}\cdot\frac{4\pi\kappa^2 d\kappa}{\Delta\kappa_x\Delta\kappa_y\Delta\kappa_z} = \frac{\pi\kappa^2 d\kappa \ell_1\ell_2\ell_3}{\pi^3} = \frac{\kappa^2 d\kappa}{\pi^2}V. \qquad (21.4)$$

От волновых чисел в формуле (21.4) перейдем к частотам. Вспомним соотношение между скоростью волны c, частотой ω и волновым числом к:

$$c = \frac{\omega}{\kappa}; \quad \Rightarrow \qquad \kappa = \frac{\omega}{c}; \qquad d\kappa = \frac{d\omega}{c}.$$

$$dN_{\omega} = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}V. \qquad (21.5)$$

Очевидно, что число волн dN_{ω} зависит от объема V, но не зависит от формы полости со светом. Найдем число осцилляторов в единице объема полости z_{ω}, приходящихся на единичный интервал частот:

$$z_{\omega} = \frac{dN_{\omega}}{Vd\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \qquad (21.6)$$

Если эту величину домножить на среднюю энергию $\langle\varepsilon\rangle$ фотона, то получится спектральная плотность энергии:

$$u(\omega,T) = z_{\omega}\langle\varepsilon\rangle. \qquad (21.7)$$

Фотон имеет спин s=1 и является бозоном. Число фотонов непостоянное, фотон может поглощаться или излучаться стенкой полости. Среднюю энергию нужно находить, используя статистику Бозе – Эйнштейна (20.4):

$$\langle\varepsilon\rangle = \varepsilon_i\langle n_i\rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}.$$

Подставляем получившееся выражение вместе с (21.6) в (21.7) и получаем еще один вывод распределения Планка (24.8) из [4]:

$$u(\omega,T) = \frac{1}{\pi^2 c^3}\frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}. \qquad (21.8)$$

Внутреннюю энергию $U(T)$ фотонного идеального газа найдем, домножив выражение (21.8) на объем полости и проинтегрировав его по частоте от 0 до ∞:

$$U(T) = V\int_0^\infty u(\omega,T)d\omega = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}d\omega.$$

Введем переменную:

$$x = \frac{\hbar\omega}{kT},\ \ dx = \frac{\hbar}{kT}d\omega.$$

Соответственно:

$$\omega = \frac{kTx}{\hbar},\ d\omega = \frac{kT}{\hbar}dx.$$

Очевидно, что интегрирование по переменной x придется проводить в тех же пределах от 0 до ∞. Продолжим интегрирование выражения (21.8), воспользовавшись табличным интегралом:

$$\int_0^\infty \frac{x^3dx}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15}.$$

$$U(T) = V\frac{\hbar}{\pi^2c^3}\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4\int_0^\infty\frac{x^3dx}{e^x-1} = V\frac{\hbar}{\pi^2c^3}\left(\frac{kT}{\hbar}\right)^4\frac{\pi^4}{15}\cdot T^4;$$

$$U(T) = \frac{4V}{c}\cdot\sigma T^4. \qquad (21.9)$$

В этой формуле $\sigma = \frac{1}{60}\frac{\pi^2k^4}{c^2\hbar^3} = 5{,}67\cdot10^{-8}$ Вт/$\left(\text{м}^2\text{К}^4\right)$ – постоянная Больцмана.

Теплоемкость фотонного газа находим как производную от внутренней энергии по абсолютной температуре при постоянном объеме:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{16\sigma\cdot VT^3}{c}. \qquad (21.10)$$

Нормальное давление p света на зачерненную стенку уже было получено в курсе Оптики – формула (28.2*б*) из [4]:

$$p = w. \tag{21.11}$$

В этой формуле w – объемная плотность энергии. При выводе (21.11) рассматривался направленный световой пучок. Внутри полости свет распространяется в любом направлении, значит, во всех направлениях сразу. Давление будет в 3 раза меньше. Домножим левую и правую части формулы (21.11) на объем полости V:

$$pV = \frac{1}{3}U. \tag{21.12}$$

Справа получим энергию всех фотонов, то есть внутреннюю энергию газа.

22. КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ КРИСТАЛЛОВ. ЗАКОН ДЮЛОНГА – ПТИ

Возьмем кристалл, в узлах которого находятся атомы, всего N штук.

1. Каждый атом имеет три степени свободы.

При высокой температуре на каждую степень свободы приходится равная доля средней кинетической энергии:

$$\varepsilon = \frac{kT}{2},$$

где k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Средняя кинетическая энергия атома равна:

$$\langle E_{\text{К}} \rangle = \frac{3}{2}kT. \qquad (22.1)$$

2. Каждый атом в кристалле является гармоническим осциллятором.

Средняя кинетическая энергия гармонического осциллятора равна его средней потенциальной энергии:

$$\langle E_{\text{П}} \rangle = \frac{3}{2}kT. \qquad (22.2)$$

Средняя механическая энергия гармонического осциллятора равна:

$$\langle E \rangle = \langle E_{\text{К}} \rangle + \langle E_{\text{П}} \rangle,$$

$$\langle E \rangle = 3kT. \qquad (22.3)$$

3. Внутренняя энергия кристалла равна полной энергии всех его атомов:

$$U = N\langle E \rangle = \nu \cdot N_A \cdot 3kT = 3\nu N_A kT.$$

В этой формуле ν – число молей вещества; N_A – число Авогадро. Учтем, что произведение постоянной Больцмана k на число Авогадро N_A равно универсальной газовой постоянной R:

$$R = N_A k,$$

и продолжим:

$$U = 3\nu RT. \qquad (22.4)$$

4. Теплоемкость кристалла это производная внутренней энергии по температуре:

$$C = \frac{dU}{dT},$$

$$C = 3\nu R. \qquad (22.5)$$

Видно, что теплоемкость атомарной кристаллической решетки не зависит от природы вещества. Формула (22.5) называется законом Дюлонга – Пти. В ней R – универсальная газовая постоянная.

5. Учтем, что $\nu = \frac{m}{M}$, где m – масса кристалла; M – его молярная масса:

$$C = m \cdot \frac{3R}{M}.$$

Удельная теплоемкость вещества:

$$c = \frac{C}{m};$$

$$C = \frac{3R}{M}. \qquad (22.6)$$

Значения, вычисленные по (22.6), неплохо совпадают с табличными данными.

6. В случае *ионной кристаллической решетки* вместо атомов в узлах находятся ионы. Вместо одного атома – два иона:

$$C = 6\ \nu R. \qquad (22.7)$$

Теплоемкость получается такая же, как и в формуле (22.5), только в два раза больше.

Экспериментальные закономерности теплоемкости кристаллов

На рис. 22.1 показана теплоемкость меди в широком диапазоне температур.

При высоких температурах теплоемкость стремится к значению:

$$C=3\nu R,$$

что находится в полном соответствии с законом Дюлонга – Пти. При очень низких температурах, как показывает опыт:

$$C \sim T^3. \qquad (22.8)$$

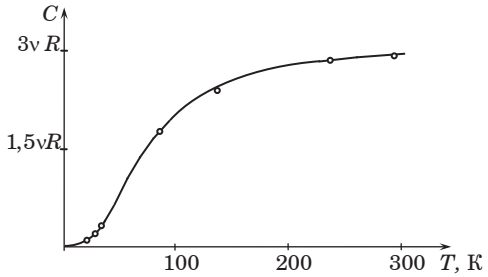

Рис. 22.1. Теплоемкость меди в широком диапазоне температур

Целью является получение универсальной формулы для теплоемкости кристалла, применимой в широком интервале температур.

23. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ КРИСТАЛЛОВ. ФОРМУЛА ЭЙНШТЕЙНА

Каждый атом в кристалле является осциллятором. Средняя полная энергия осциллятора при высоких температурах равна:

$$\langle \varepsilon \rangle = kT.$$

При низких и умеренных температурах эта формула неприменима. Энергия осциллятора квантуется, то есть принимает дискретные значения. При решении задачи о квантовом осцилляторе получилась формула (11.5):

$$\varepsilon_{n=}(n+{}^{1}/_{2})\cdot\hbar\omega.$$

В этой формуле ω – частота колебаний осциллятора, n=0, 1, 2, 3, … – квантовое число. В состоянии термодинамического равновесия уровни осциллятора заселены в соответствии с распределением Больцмана и среднее значение вычисляется по формуле:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum \varepsilon_n}{N}.$$

В этой формуле N – полное число осцилляторов. Проделав такие же выкладки, как при выводе формулы (24.7) в [4], получим:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \qquad (23.1)$$

В отличие от (24.7) из [4], в этой формуле присутствуют нулевые колебания с энергией:

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Нужно учесть, что формула (23.1) получена для одномерного осциллятора, но в кристалле осцилляторы трехмерные. Каждый из них имеет среднюю энергию в три раза большую, чем по формуле (23.1).

Внутренняя энергия всего кристалла U складывается из энергий каждого осциллятора. Число таких осцилляторов N есть число атомов в кристалле:

$$U = N\langle \varepsilon \rangle = \frac{3}{2}N\hbar\omega + \frac{3N\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1};$$

$$U = U_0 + \frac{3N\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \qquad (23.2)$$

Теплоемкость кристалла C – это производная от внутренней энергии по температуре. Найдем ее:

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{dU_0}{dT} + 3N\hbar\omega \frac{d}{dT}\frac{1}{\left(e^{\hbar\omega/kT} - 1\right)} = \frac{dU_0}{dT} + \frac{3N\hbar\omega \cdot e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\hbar\omega/kT} - 1\right)^2} \cdot \frac{\hbar\omega}{kT^2};$$

$$C = 3N \cdot \frac{\hbar^2\omega^2}{kT^2} \cdot \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\hbar\omega/kT} - 1\right)^2} = 3Nk \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\hbar\omega/kT} - 1\right)^2}.$$

Учтем, что полное число атомов можно представить произведением числа Авогадро N_A на число молей ν вещества:

$$N = N_A\nu.$$

Постоянная Больцмана k равна универсальной газовой постоянной R, деленной на число Авогадро:

$$k = \frac{R}{N_\text{A}}.$$

Следовательно, $Nk = \nu R$. Окончательно получаем:

$$C = 3\nu R \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\hbar\omega/kT} - 1\right)^2}. \qquad (23.3)$$

Исследуем полученную формулу при высоких температурах. Показатель экспоненты $\hbar\omega/kT$ стремится к нулю. Экспоненту в числителе заменяем единицей. Экспоненту в знаменателе раскладываем в ряд по малому параметру и сохраняем два первых слагаемых:

$$e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} = 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}.$$

$$C = 3\nu R \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot \frac{1}{\left(1 + \left(\hbar\omega/kT\right) - 1\right)^2} = 3\nu R \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot \left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^2 = 3\nu R.$$

Мы получили закон Дюлонга – Пти $C = 3\nu R$.

Исследуем формулу (23.3) при низких температурах. Экспонента принимает большое значение, единицей в знаменателе пренебрегаем:

$$C = 3\nu R \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\hbar\omega/kT} - 1\right)^2} \approx 3\nu R \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\hbar\omega/kT}\right)^2} =$$

$$= 3\nu R \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}};$$

$$C = 3\nu R \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \cdot e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}. \qquad (23.4)$$

Поскольку экспонента убывает быстрее любой степенной функции, при $T \to 0$ теплоемкость стремится к нулю экспоненциально. Опыт же показывает, что при малых температурах теплоемкость пропорциональна третьей степени температуры (22.8). Эйнштейн ввел характеристическую температуру:

$$\theta = \frac{\hbar\omega}{k}, \qquad (23.5)$$

в которой ω – частота колебаний кристаллической решетки.

Формула Эйнштейна лишь качественно правильно описывает зависимость теплоемкости кристалла от температуры при $T \to 0$.

24. ФОНОНЫ. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ ДЕБАЯ

Каждый атом в кристалле является осциллятором. Осцилляторы в кристалле связаны друг с другом. Смещение одного из них вызывает смещение соседнего. Если кристалл состоит из N атомов, которые имеют $3N$ степеней свободы, то такой кристалл имеет $3N$ – шесть нормальных колебаний. Шесть степеней свободы связаны с механическим перемещением и вращением кристалла.

Названные колебания совершает весь кристалл в целом, а не отдельные атомы. Каждое из этих колебаний происходит независимо от остальных. Энергия i-го колебания равна:

$$E_i = (n_i + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_i.$$

Эта энергия может меняться порциями – *квантами*. Это кванты акустического, то есть звукового, поля в колеблющемся кристалле:

$$\varepsilon_i = \hbar\omega_i. \tag{24.1}$$

Любой энергии в квантовой механике соответствует частица. Частица, несущая квант звука, называется *фононом*. Во многом фонон похож на фотон, однако есть различия. Фотон может существовать как в среде, так и в вакууме. Фонон не может существовать в вакууме, поскольку звук распространяется только в упругой среде. Фонон является *квазичастицей*. Скорость фонона равна скорости звука υ в кристалле. Импульс фонона равен:

$$p_i = \frac{\hbar\omega_i}{\upsilon}. \tag{24.2}$$

Поскольку расстояния между соседними энергетическими уровнями квантового осциллятора одинаковые (формула 11.5), один и тот же фонон может быть испущен при переходе с любого возбужденного уровня. Могут быть испущены сразу несколько одинаковых фононов. Значит, фонон – это бозон. Спин фонона равен нулю, в отличие от фотона, имеющего спиновое число s=1.

Колебания кристаллической решетки можно представить как фононный газ, заполняющий объем кристалла.

Каждое колебание имеет свою частоту и, соответственно, длину волны. Минимальная длина волны, имеющая физический смысл, равна удвоенному расстоянию между соседними атомами в решетке. Максимальная частота колебаний кристалла равна:

$$\omega_{\max} = \frac{2\pi\upsilon}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi\upsilon}{d}.$$

В этой формуле d – расстояние между соседними атомами. Для кубической решетки это расстояние связано с концентрацией атомов:

$$\omega_{\max} = \pi\upsilon\sqrt[3]{n}.$$

Строгий расчет дает значение:

$$\omega_{\max} = \upsilon\sqrt[3]{6\pi^2 n}. \qquad (24.3)$$

Для кристаллов вводят характеристическую температуру Дебая:

$$\theta = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k}. \qquad (24.4)$$

Дебаю удалось получить формулу для теплоемкости кристалла:

$$C = 9\nu R\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \cdot \int_0^{\theta/T} \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2}. \qquad (24.5)$$

Что такое x в этом выражении – уже совершенно неважно, хотя при выводе формулы (который здесь опустим) предполагалось, что $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$.

Рассмотрим два предельных случая: очень малых и очень больших температур.

1. $T \gg \theta$. В этом случае $x \ll 1$. Экспоненту раскладываем в ряд и ограничиваемся в числителе единицей, а в знаменателе $e^x = 1 + x\ldots$

$$C = 9\nu R\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \cdot \int_0^{\theta/T} \frac{1 \cdot x^4 dx}{(1 + x - 1)^2} = 9\nu R\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \cdot \int_0^{\theta/T} x^2 dx =$$

$$= 9\nu R\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \cdot \frac{x^3}{3}\Bigg|_0^{\theta/T} = 9\nu R\left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \cdot \frac{1}{3}\left(\frac{\theta}{T}\right)^3 = 3\nu R.$$

Получилась формула Дюлонга – Пти (22.5).

2. $T \ll \theta$. Верхний предел интеграла заменяем бесконечностью. Интеграл становится просто числом. Обозначим это число буквой I. Теплоемкость кристалла в этом случае равна:

$$C = \frac{9\nu RI}{\theta^3} T^3.$$

Результат находится в согласии с выражением (22.8).

При умеренных температурах рассчитанные значения теплоемкости приведены на графике 22.1. Там же кружками даны измеренные значения. Видно, что расчет очень хорошо совпадает с экспериментом в широкой области температур.

25. ЭЛЕКТРОННЫЙ ФЕРМИ – ГАЗ В МЕТАЛЛАХ

Свободные электроны в металле в некотором приближении можно рассматривать как атомы идеального газа. Состояния частиц в трехмерной потенциальной яме дискретные. Энергия и волновая функции частиц квантуются. Электроны являются фермионами, их спин равен $s={}^1/_2$, поэтому для них должна быть справедлива статистика Ферми – Дирака, формула (20.2).

В рассматриваемом случае состояние частицы определяется не четырьмя, а тремя квантовыми числами. В одном квантовом состоянии могут находиться сразу два электрона с противоположно ориентированными спинами, то есть с квантовыми числами $m_s=-{}^1/_2$ и $m_s=+{}^1/_2$. Такое состояние является вырожденным. Число заполнения энергетического уровня в этом случае может быть $n=0, 1, 2$.

Статистика Ферми – Дирака для электрона в металле переписывается следующим образом:

$$\langle n_i \rangle = \frac{2}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1}. \qquad (25.1)$$

Если энергия частицы в этой формуле равна энергия Ферми – $E_i=E_F$, то средняя заселенность такого уровня равна 1. Исследуем написанную функцию (25.1) при нуле по Кельвину. Конечно же, строго говоря, при $T \to 0$.

1) Рассмотрим малые энергии $E_i < E_F$, то есть $E_i - E_F < 0$.

В показателе экспоненты имеем очень большое по модулю отрицательное число. Экспонента равна нулю, $< n_i > \; = \; 2$.

При малых энергиях на каждом уровне находятся по 2 электрона.

2) Рассмотрим большие энергии $E_i > E_F$, то есть $E_i - E_F > 0$.

В показателе экспоненты имеем очень большое по модулю положительное число. Экспонента равна бесконечности, $< n_i > \; = \; 0$.

При больших энергиях средняя заселенность энергетических уровней равна нулю.

3) Рассмотрим уровень энергии $E_i = E_F$, то есть $E_i - E_F = 0$.

В показателе экспоненты имеем ноль. Экспонента равна единице, $< n_i > \; = \; 1$.

Средняя заселенность энергетических уровней равна единице.

Исследуемая функция при абсолютном нуле по Кельвину представляет собой ступеньку равную 2 при $E < E_F$ и равную 0 при $E > E_F$.

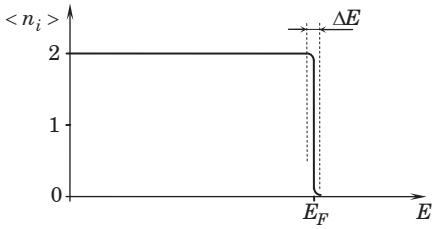

Рис. 25.1. Средняя заселенность уровней энергии в металле при $T \to 0$

Уровень Ферми – это наивысший заполненный уровень энергии при абсолютном нуле температуры.

Разумеется, температура T=0 К недостижима. При $T \to 0$ углы этой ступеньки немного сглажены, как показано на рис. 25.1. Ширина размытости ступеньки составляет $\Delta E \sim kT$. Только в этой области энергий имеются одиночные, неспаренные электроны. Существование таких электронов имеет огромное значение.

Лишь неспаренные электроны участвуют в протекании электрического тока. Спаренные электроны участвуют в тепловом движении, но электрический ток не создают. Почему? Обратимся к наглядному образу – эскалатору в метро. Каждая ступенька эскалатора подобна энергетическому состоянию, в котором одновременно могут находиться не более двух электронов – двух пассажиров. Электрический ток потечет в случае, когда пассажиры-электроны побегут по ступенькам сверху вниз (именно побегут, а не поедут вместе с эскалатором). Для шага вниз нужно, чтобы там было свободное место. Если оба места на нижней ступеньке заняты, человек может только толкаться, то есть участвовать в тепловом движении, но шагнуть вниз не может – некуда. Пока место снизу не освободится, ток не потечет.

Энергия Ферми – это параметр, слабо зависящий от температуры. При абсолютном нуле по Кельвину этот параметр может быть вычислен по формуле:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot (3\pi^2 n)^{2/3}, \qquad (25.2)$$

где n – концентрация свободных электронов; m – их масса. Типичные значения n для металлов составляют 10^{28}–10^{29} м$^{-3}$. Если взять среднее значение в этом интервале, то получаем энергию Ферми:

$$E_F = 8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 5 \text{ эВ}.$$

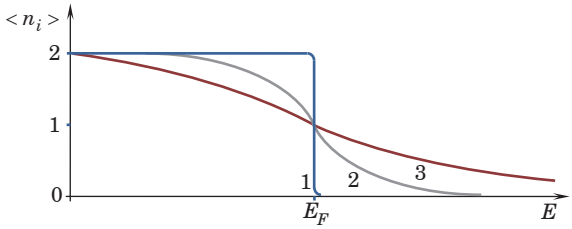

Рис. 25.2. Средняя заселенность уровней энергии в металле при различных температурах

Средняя энергия всех свободных электронов в металле равна:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F(0). \tag{25.3}$$

Кроме энергии Ферми вводят температуру Ферми:

$$T_F = \frac{E_F(0)}{k}. \tag{25.4}$$

Вычисляем, получаем типичное значение T_F=60 000 К. Это значение в 200 раз больше комнатной температуры, значит, комнатная температура для электронного газа в металлах – это практически абсолютный ноль. Ступенька на рис. 25.1 при комнатной температуре размыта на 0,5 %. Такой электронный газ называется вырожденным.

Приведенные выше оценки относятся к металлам. Для полупроводников температура Ферми намного меньше и среднее заполнение электронного уровня заметно отличается от 2 при разных энергиях.

На рис. 25.2 показана средняя заселенность энергетических уровней при различных, сильно отличающихся температурах. Кривая 1 соответствует металлам при комнатной температуре. Кривые 2 и 3 соответствуют полупроводникам при низких и высоких температурах. В третьем случае температура образца больше температуры Ферми. Такой электронный газ называется невырожденным.

26. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Рассмотрим два тождественных атома с одинаковыми энергетическими уровнями. На нижних уровнях находятся по два электрона. На валентных уровнях может быть по одному. Верхние энергетические уровни вакантны. Если атомы сближать до образования молекулы, то на каждом нижнем уровне окажется по четыре электрона. Принцип Паули запрещает это. При сближении атомов два одинаковых уровня превращаются в два неодинаковых, как показано на рис. 26.1.

Чем ближе друг к другу находятся атомы, тем больше расщепление. Расщепляются как заполненные, так и вакантные уровни. Чем выше энергетический уровень, тем больше расщепление. Сдвиг уровня «вверх» больше, чем сдвиг уровня «вниз». Расщепленные уровни могут пересекаться. Совокупная энергия всех электронов в молекулярной оболочке меньше энергии всех электронов в атомных оболочках. Образование молекулы энергетически выгодно. По тем же правилам происходит расщепление уровней энергии при образовании молекулы из разных атомов и при образовании многоатомных молекул.

Рассмотрим N тождественных атомов с одинаковыми уровнями энергии. При их сближении каждый энергетический уровень расщепляется на N компонент. Каждый энергетический уровень превращается в энергетическую зону. Схема образования энергетических зон показана на рис. 26.2.

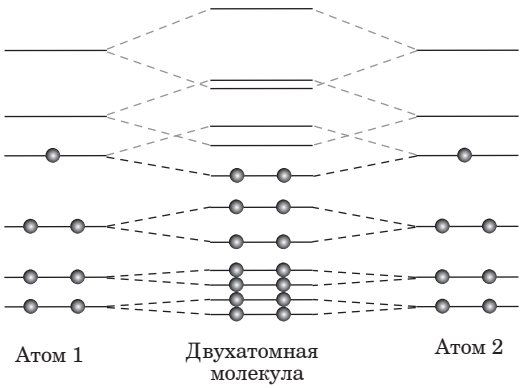

Рис. 26.1. Энергетические уровни двух атомов и двухатомной молекулы

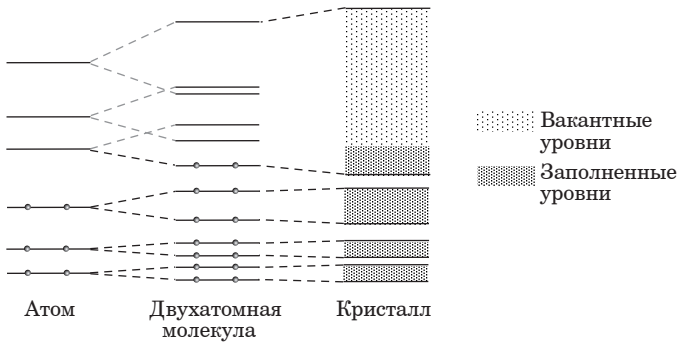

Рис. 26.2. Энергетические уровни атома, двухатомной молекулы и кристалла

Границы энергетических зон определяются взаимодействием ближайших друг к другу атомов. Это значит, что границы зон раздвинуты примерно на величину расщепления в двухатомной молекуле (на самом деле немного больше). Очень важно, что каждый уровень энергии не бесконечно узкий. Его ширина ΔE определяется соотношением неопределенностей (3.2):

$$\Delta E \Delta t = \hbar/2. \qquad (26.1)$$

В этой формуле Δt – время оседлой жизни электрона в состоянии. Таким образом, бесконечно узкая «линия» превращается в узкую «полоску». Количество атомов в кристалле N очень большое, поэтому энергетические уровни в кристалле сливаются в квазинепрерывную зону. В этой зоне уровни энергии квантуются, но энергия при этом может принимать любые значения.

Между нижними зонами есть промежутки, верхние зоны сливаются. Электроны заполняют не все уровни в зонах, а лишь нижние, показанные на рис. 26.2. При образовании кристалла могут получиться три качественно разных случая, показанных на рис. 26.3.

Если валентные электроны заполняют часть энергетической зоны, а выше имеются вакантные уровни, то такой кристалл является металлом. При любой температуре возникают возбужденные не спаренные электроны, которые являются носителями электрического тока.

У полупроводников и диэлектриков имеется промежуток между последней заполненной (валентной) зоной и вакантной зоной. Все электроны спарены, проводимости нет. При низких температурах эти вещества являются изоляторами. Энергия теплового движения

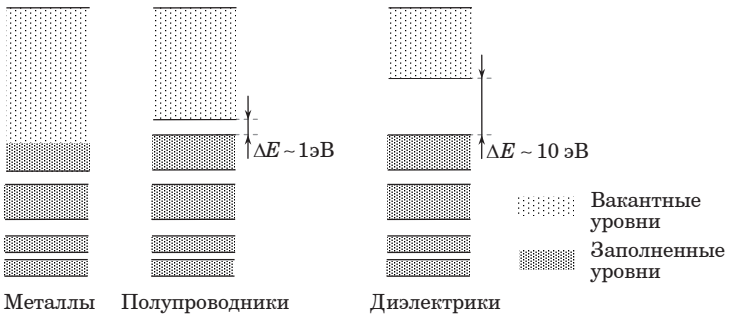

Рис. 26.3. Образование металлов, полупроводников и диэлектриков

при комнатной температуре составляет $kT \sim 0{,}025$ эВ. Энергетический зазор порядка 10 эВ в диэлектриках непреодолим для теплового движения. Диэлектрики при любых температурах являются изоляторами. В полупроводниках при комнатной температуре некоторая очень малая часть электронов преодолевает запретную зону за счет теплового движения. Полупроводники имеют очень малую проводимость. При нагревании полупроводника количество носителей в верхней зоне увеличивается, проводимость растет.

27. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНА

Электрон в кристалле можно и нужно рассматривать как волну с длиной:

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$

Волновое число $(\kappa = 2\pi/\lambda)$ электрона при этом равно:

$$\kappa = \frac{p}{\hbar}. \qquad (27.1)$$

В этих формулах p – импульс электрона.

Фазовая скорость волны, как известно, равна $\upsilon = \omega/\kappa$. Скорость частицы определяется не фазовой, а групповой скоростью волны ДеБройля:

$$\upsilon_{\Gamma} = \frac{d\omega}{d\kappa} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar\kappa)} = \frac{dE}{dp};$$

$$\upsilon_{\Gamma} = \frac{dE}{dp}. \qquad (27.2)$$

Продифференцируем по времени получившееся выражение и получим ускорение электрона:

$$a = \frac{d^2E}{dpdt} = \frac{d^2E}{dpdp} \cdot \frac{dp}{dt} = \frac{d^2E}{dp^2} \cdot \sum F;$$

$$\vec{a} = \frac{d^2E}{\hbar^2 d\kappa^2} \cdot \sum \vec{F}. \qquad (27.3)$$

Множитель, стоящий перед суммой всех действующих на электрон сил, согласно второму закону Ньютона является обратной массой электрона.

Эффективной массой электрона в поле кристаллической решетки называется:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(d^2E/d\kappa^2\right)} \qquad (27.4a)$$

или

$$m^* = \frac{1}{\left(d^2E/dp^2\right)}. \qquad (27.4б)$$

В это понятие включаем все не известные нам силы, действующие на электрон в периодическом поле кристаллической решетки. Посмотрим, как согласуется это понятие с классической массой. Считаем, что полная энергия частицы (она же кинетическая) равна:

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

$$\frac{dE}{dp} = \frac{2p}{2m} = \frac{p}{m}; \qquad \frac{d^2E}{d^2p} = \frac{1}{m}; \qquad \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m}; \qquad m^* = m.$$

В классическом случае, когда зависимость $E(p)$ является квадратичной параболой, как на рис. 27.1, эффективная масса равна обыкновенной массе:

В общем случае эффективная масса определяется кривизной дисперсионной кривой E(к) или кривизной графика зависимости $E(p)$. Соответствующая зависимость дана на рис. 27.2.

– В области 1 зависимость E(к) классическая, такая же как на рис. 26.1. Эффективная масса равна классической $m^* = m$. – В области 2 кривизна функции E(к) равна нулю. Эффективная масса равна нулю $m^* = 0$.

– В области 3 кривизна функции E(к) направлена в обратную сторону. Эффективная масса отрицательна $m^* < 0$.

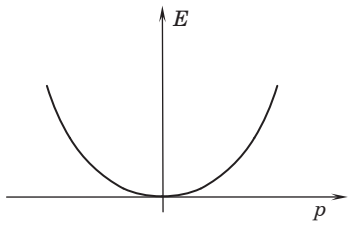

Рис. 27.1. Классическая зависимость E(p)

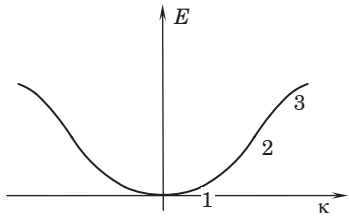

Рис. 27.2. Дисперсионная кривая E(к)

28. ПОЛУПРОВОДНИКИ

Полупроводниками являются кристаллические тела, у которых при 0 К валентная зона полностью заполнена электронами, а запретная зона между зоной проводимости и валентной зоной порядка 1 эВ. Типичными полупроводниками являются элементы IV группы таблицы Менделеева (Si, Ge). При комнатной температуре некоторое (очень небольшое) число электронов могут преодолеть запретную зону за счет теплового движения. При этом в зоне проводимости возникают неспаренные электроны, а вместе с ними – электропроводность.

Электрон, перескочивший из валентной зоны в зону проводимости, оставляет в валентной зоне вакансию, или *дырку*, которая блуждает по кристаллу и ведет себя, как частица с положительным зарядом. Покажем это. Поскольку спаренные электроны валентной зоны не создают электрический ток, суммарная скорость всех электронов равна нулю. Электроны участвуют только в хаотическом тепловом движении:

$$\sum_i \vec{\upsilon}_i = 0.$$

Представим эту сумму как скорость одного удаленного электрона $\vec{\upsilon}_k$ и всех остальных:

$$\sum_{i \neq k} \vec{\upsilon}_i + \vec{\upsilon}_k = 0; \quad \vec{\upsilon}_k = -\sum_{i \neq k} \vec{\upsilon}_i.$$

Получается, что суммарная скорость всех оставшихся в валентной зоне электронов не равна нулю. Она равна скорости удаленного электрона с обратным знаком. У электронов появилось направленное движение. Валентная зона становится электропроводной.

Выделение и удаление из суммы скоростей скорости одного из электронов эквивалентно внедрению частицы с обратной скоростью. Получается, что в валентную зону внедряется частица со скоростью равной скорости всех остальных электронов.

Удаление из электрически нейтрального пространства отрицательно заряженного электрона эквивалентно внедрению в него положительно заряженной частицы.

Электроны перепрыгивают в зону проводимости с самого верха зоны проводимости. В самом верху валентной зоны у дисперсионной кривой наблюдается область 3 (рис. 27.2). Удаляется электрон с отрицательной эффективной массой. Удаление из валент-

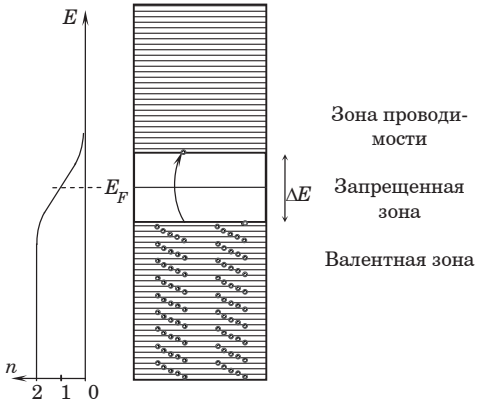

Рис. 28.1. Распределение электронов по энергетическим уровням

ной зоны частицы с отрицательной массой эквивалентно внедрению в эту зону частицы с положительной массой.

Получается, что в валентной зоне появляется положительно заряженная частица с положительной массой, которая имеет некоторую скорость направленного движения во внешнем электрическом поле. Эту частицу называют дыркой. Дырочная проводимость создается движением всех остальных электронов валентной зоны, но воспринимается как движение локализованной частицы.

На рис. 28.1 показаны валентная зона, зона проводимости и запрещенная зона полупроводника, а слева – статистика Ферми – Дирака (25.1), показывающая среднюю заселенность соответствующих уровней:

$$\langle n_i \rangle = \frac{2}{e^{\frac{E_i - E_F}{kT}} + 1}. \qquad (28.1)$$

Электрон перескакивает с самого верха валентной зоны в самый низ зоны проводимости. Уровень Ферми в полупроводнике без примесей находится точно в середине запрещенной зоны. Поэтому:

$$E_i - E_F = \frac{\Delta E}{2}.$$

Поскольку разрешенные уровни энергии расположены далеко от уровня Ферми, единицей в знаменателе (28.1) можно пренебречь:

$$< n_i > = 2 \cdot e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}.$$

Количество электронов и дырок, создающих электрический ток, пропорционально этому выражению, поэтому удельная проводимость имеет точно такую же зависимость:

$$\sigma = \sigma_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}. \qquad (28.2)$$

В этой формуле σ – удельная проводимость полупроводника; σ_0 – некоторая константа. Логарифмируем это выражение:

$$\ln\sigma = \ln\sigma_0 - \frac{\Delta E}{2kT}. \qquad (28.3)$$

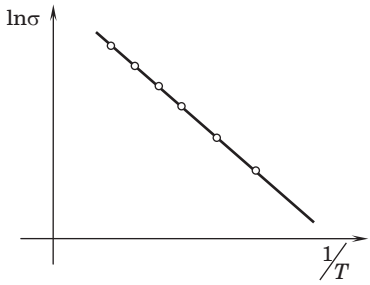

Рис. 28.2. Температурная зависимость проводимости полупроводника от обратной температуры

На рис. 28.2 приведен график функции (28.3) в координатах lnσ от T^{-1}.

Функция на графике 28.2 линейная с угловым коэффициентом $\Delta E/2k$. Преобразуя (28.3), получаем:

$$\Delta E = 2k \cdot \frac{\Delta(\ln\sigma)}{\Delta(1/T)}. \qquad (28.4)$$

Таким образом, по температурной зависимости удельной проводимости можно экспериментально найти ширину запрещенной зоны.

29. ПРИМЕСНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Если в кристаллическую решетку полупроводника, которая образована четырехвалентными атомами, внедрить некоторое количество *пятивалентных* атомов, то они встроятся в решетку. Четыре валентных электрона будут участвовать в ковалентных связях с соседними атомами решетки, а пятый электрон лишний. Он кристаллической решетке не нужен. Он в связях не участвует, а потому слабо связан с решеткой. Этот электрон очень легко отрывается от своего «родного» атома и становится свободным. Встроенный пятивалентный атом становится *донором* электрона. Образовавшиеся свободные электроны участвуют в протекании электрического тока. В полупроводнике при достаточно низких температурах появляется электронная проводимость. На месте отрыва электрона образуется положительный заряд, который локализован на конкретном пятивалентном атоме, потому неподвижен, дырки не образуется. Дырочной проводимости в описываемом случае нет. Проводимость связана исключительно со свободными электронами, то есть с отрицательно заряженными частицами. Такие полупроводники называются полупроводниками *n*-типа, от слова *negative*, то есть отрицательный.

Если в кристаллическую решетку полупроводника, которая образована четырехвалентными атомами, внедрить некоторое количество *трехвалентных* атомов, то они встроятся в решетку. В ковалентных связях с соседними атомами решетки должны участвовать четыре валентных электрона, но в атоме примеси есть только три. Встроенный атом захватывает четвертый электрон и становится *акцептором*. Вместе с этим образуется дырка, которая участвует в протекании электрического тока. В полупроводнике при достаточно низких температурах появляется дырочная проводимость. На месте атома-акцептора образуется отрицательный заряд, который локализован на конкретном трехвалентном атоме, а потому неподвижен. Подвижных отрицательных зарядов не образуется. Электронной проводимости в описываемом случае нет. Проводимость связана исключительно с дырками, то есть с положительно заряженными частицами. Такие полупроводники называются полупроводниками *p*-типа, от слова *positive*, то есть положительный.

Обратимся к схемам энергетических уровней в полупроводниках *n*- и *p*-типа, показанным на рис. 29.1*а*, *б*.

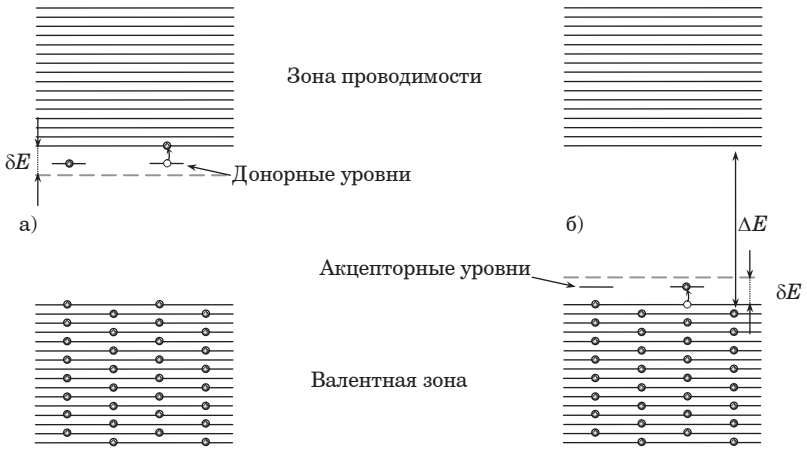

Рис. 29.1. Схема энергетических уровней в полупроводниках: а – n-типа; б – p-типа

Поскольку пятый валентный электрон легко отрывается от своего атома, донорные уровни в полупроводнике n-типа лежат вблизи дна зоны проводимости. Изначально эти уровни заполнены. Однако энергетический зазор δE на рис. 29.1*а* преодолевается гораздо легче, чем вся запретная зона ΔE. Поэтому в зоне проводимости электронов с донорных уровней возникает гораздо больше, чем из валентной зоны. Уровень Ферми в полупроводниках n-типа лежит вблизи донорных уровней, то есть вверху запрещенной зоны.

Теперь рассмотрим полупроводник p-типа. К трехвалентному атому очень легко «прилипает» электрон из соседней связи. Дырка уходит блуждать по кристаллу. Акцепторные уровни примеси на рис. 29.1*б* лежат внизу запрещенной зоны около самого верха валентной зоны. Изначально они вакантны. Однако энергетический зазор δE на рис. 29.1*б* гораздо меньше и преодолевается гораздо легче, чем вся запретная зона ΔE. Поэтому в валентной зоне дырок возникает гораздо больше, чем при перескоке электрона через запрещенную зону ΔE. Уровень Ферми в полупроводниках p-типа лежит вблизи донорных уровней, то есть внизу запрещенной зоны.

При низких температурах примесная проводимость в проводниках обоих типов существенно превосходит собственную проводимость. При повышении температуры концентрация примесных носителей достигает насыщения, собственная проводимость начинает играть некоторую роль.

30. КОНТАКТ ПОЛУПРОВОДНИКОВ P- И N-ТИПОВ

Если привести в контакт полупроводники *p*- и *n*-типа, то акцепторные (3-валентные) и донорные (5-валентные) примеси диффундируют через границу и образуют *p*–*n*-переход. На рис. 30.1 показаны концентрации примесных атомов вблизи границы.

В области контакта примесные дырки и электроны активно рекомбинируют, то есть нейтрализуют друг друга. На границе образуется слой без примесных носителей. Сопротивление этого слоя очень большое. В нем возможна только собственная проводимость.

Нужно вспомнить, что в полупроводнике *p*-типа кроме дырок образуются неподвижные отрицательные ионы, а в полупроводнике *n*-типа – неподвижные положительные ионы. Эти ионы образуются из атомов трехвалентной и пятивалентной примеси соответственно. Вне зоны контакта электрический заряд, распределенный по объему кристалла, компенсируется свободными носителями другого знака. В зоне контакта примесных носителей становится очень мало, граница оказывается заряженной: в области *n*-типа положительно, в области р-типа отрицательно. Возникающее электрическое поле препятствует проникновению основных примесных носителей в область контакта, что увеличивает электрическое сопротивление области контакта.

Возникновение электрического поля в области *p*–*n*-перехода приводит к смещению уровней энергии в полупроводниках по разные стороны границы. Энергия уровней в полупроводнике *p*-типа увеличивается, *n*-типа – уменьшается. Процесс идет до выравнивания энергий Ферми в обоих полупроводниках. Сами уровни энергии и границы зон при переходе через границу искривляются, как это показано на рис. 30.2. Отметим, что описанный механизм никоим образом не касается собственной проводимости полупроводника.

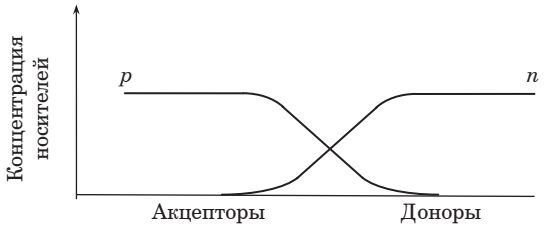

Рис. 30.1. Концентрация донорных и акцепторных примесей вблизи границы полупроводников

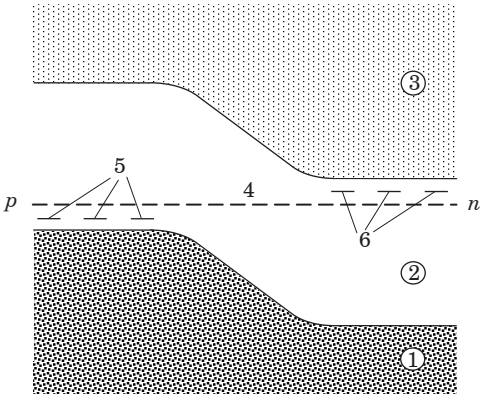

Рис. 30.2. Искривление уровней энергии при p–n-переходе:
1 – валентная зона; 2 – запрещенная зона; 3 – зона проводимости;
4 – уровень Ферми; 5 – акцепторные уровни; 6 – донорные уровни

Если *p–n*-переход подключить к источнику тока так, что область *n* с электронной проводимостью будет с соединена плюсом, а область *p* с дырочной проводимостью – с минусом, то основные носители будут удаляться внешним полем от *p–n*-перехода в противоположные стороны, увеличивая его толщину и сопротивление. Ток в этом случае создается неосновными носителями. Сила тока через переход мала и почти не зависит от напряжения. Такое включение называется *обратным*.

Если *p–n*-переход подключить к источнику тока так, что область *n* с электронной проводимостью будет соединена с минусом, а об-

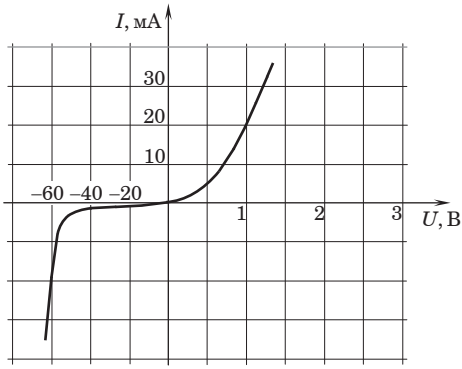

Рис. 30.3. Вольтамперная характеристика полупроводникового диода

ласть *p* с дырочной проводимостью – с плюсом, то поле источника облегчает переход основных носителей через область контакта. Сопротивление *p–n*-перехода в этом случае невелико и сила тока зависит от напряжения, подаваемого источником, и от сопротивления внешней цепи. Такое включение называется *прямым*.

Ток в прямом направлении проходит через *p–n*-переход. В обратном направлении ток практически не идет. Это свойство используется в полупроводниковых диодах для выпрямления тока, то есть для преобразования переменного тока в постоянный. Вольтамперная характеристика полупроводникового диода представлена на рис. 30.3.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. *Фриш С. Э., Тиморева А. В.* Курс общей Физики: учеб. пособие: в 3 т. Т. 3: Оптика. Атомная физика. М., 1962. 608 с.

2. *Иродов И. Е.* Квантовая физика, основные законы. М.: Бином Лаборатория знаний, 2020. 256 с.

3. *Савельев И. В.* Курс общей физики. Т. 5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. СПб.: Лань, 2011. 484 с.

4. *Коваленко И. И., Лавровская Н. П., Котликов Е. Н.* Курс физики: учеб. пособие: в 6 ч. Ч. 4: Оптика. СПб.: ГУАП, 2021. 131 с.

5. *Коваленко И. И.* Курс физики: учеб. пособие: в 6 ч. Ч. 1: Механика. Колебания и волны. СПб.: ГУАП, 2019. 177 с.

6. *Коваленко И. И.* Курс физики: учеб. пособие: в 6 ч. Ч. 3: Электричество и магнетизм. СПб.: ГУАП, 2020. 143 с.

7. *Холодова С. Е., Перегудин С. И.* Специальные функции в задачах математической физики. СПб.: ИТМО, 2012. 72 с.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение 5
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА 7
1. Волны де Бройля 7
2. Корпускулярно-волновой дуализм 11
3. Соотношение неопределенностей 12
4. Постулаты квантовой механики 15
5. Волновая функция 17
6. Уравнение Шрёдингера 18
7. Столкновение квантовой частицы с потенциальным барьером 21
8. Квантовая частица в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками 28
9. Квантовая частица в непроницаемой сфере 32
10. Квантовая частица в непроницаемом потенциальном ящике 35
11. Квантовый осциллятор 40
12. Квантовый ротатор 44
13. Атом водорода в квантовой механике 48
14. Спин электрона 54
15. Уравнение Дирака. Частицы и античастицы 58
16. Квантовая система тождественных частиц 61
17. Заполнение электронных оболочек 66
18. Спонтанные и вынужденные переходы 71
19. Принцип работы лазера 74
СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА... 78
20. Классическая статистика и квантовые статистики 78
21. Фотонный газ 80
22. Классическая теория теплоемкости кристаллов. Закон Дюлонга – Пти 85
23. Квантовая теория теплоемкости кристаллов. Формула Эйнштейна 88
24. Фононы. Квантовая теория теплоемкости Дебая 91
25. Электронный Ферми – газ в металлах 94
26. Энергетические зоны в кристаллах 97
27. Эффективная масса электрона 100
28. Полупроводники 102
29. Примесная проводимость полупроводников 105
30. Контакт полупроводников p- и n-типов 107
Список источников 110

Учебное издание

Коваленко Иван Иванович,
Лавровская Наталья Павловна

КУРС ФИЗИКИ

Часть 5

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Учебное пособие

ISBN: 978-5-8088-1849-1

9 785808 818491

Редактор *Е. В. Торопова*
Компьютерная верстка *А. Н. Колешко*

Подписано к печати 07.02.2023. Формат 60 × 84 1/16.
Усл. печ. л. 6,4. Уч.-изд. л. 6,6.
Тираж 50 экз. Заказ № 277.

Редакционно-издательский центр ГУАП
190000, г. Санкт-Петербург, ул. Большая Морская, д. 67, лит. А