

**Г.А. Миронова, Н.Н. Брандт, А.М. Салецкий,  
О.П. Поляков, О.О. Трубачев**

**ВВЕДЕНИЕ**  
**В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ**  
**В ВОПРОСАХ И ЗАДАЧАХ**



Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова  
Москва

М и р о н о в а Г.А., Б р а н д т Н.Н., С а л е ц к и й А.М., П о л я -  
к о в О.П., Т р у б а ч е в О.О. **Введение в квантовую физику в вопросах и**  
**задачах.** Уч. пособие. — М.: Физический факультет МГУ, 2012. 320 с.  
ISBN 978-5-8279-0109-9

В учебном пособии изложены методические основы решения задач раздела «Введение в квантовую физику» из курса общей физики. Каждая глава начинается с краткого изложения теории: даются формулировки законов и определений физических величин, акцентируется внимание на физической сущности законов и основных принципах решения задач. Приводится подробное решение ряда стандартных задач, анализируются и интерпретируются полученные результаты, оценивается правильность решений. Обсуждаются вопросы, возникающие у студентов в ходе решения задач. Решение задач сопровождается поясняющими рисунками.

Пособие написано на основании опыта проведения семинарских занятий по курсу общей физики на физическом факультете МГУ им. М.В. Ломоносова.

Книга предназначена для преподавателей, ведущих семинарские и практические занятия по разделу «Введение в квантовую физику» курса «Общая физика» и для студентов вузов, изучающих общую физику; может быть особенно полезной для начинающих преподавателей. Книга может быть также интересна для всех желающих самостоятельно изучить основные понятия квантовой физики на примерах решения задач.

Рецензент: профессор *Г.С. Плотников*

Учебное издание

**ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВУЮ ФИЗИКУ**  
в вопросах и задачах

Подписано в печать 5.07.2012 г.  
Формат 60 × 90/16. Объем 20 п.л. Тираж 200 экз.  
Заказ № 0867

Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова  
119991 Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Отпечатано в Типографии МГУ им. М.В. Ломоносова

ISBN 978-5-8279-0109-9

© Физический факультет МГУ  
им. М.В. Ломоносова, 2012 г.  
© Коллектив авторов, 2012 г.

# Содержание

|                                                                                                                 |            |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Предисловие .....</b>                                                                                        | <b>5</b>   |
| <b>Глава 1. Корпускулярные свойства электромагнитных волн. Фотоны.....</b>                                      | <b>14</b>  |
| §1.1. Корпускулярно-волновой дуализм света. Фотоны .....                                                        | 14         |
| §1.2. Работа выхода. Внешний фотоэффект и его законы.....                                                       | 19         |
| §1.3. Обратный фотоэффект. Тормозное рентгеновское излучение .....                                              | 24         |
| §1.4. Давление света.....                                                                                       | 25         |
| §1.5. Излучение абсолютно черного тела .....                                                                    | 29         |
| §1.6. Фотоны и электроны. Эффект Комптона. Рассеяние Томсона .....                                              | 33         |
| Приложение 1.1. Интенсивность и вероятность. Флуктуации<br>интенсивности в световом пучке .....                 | 39         |
| Приложение 1.2. Электромагнитные волны в плазме .....                                                           | 40         |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                        | 41         |
| <b>Глава 2. Волновые свойства частиц. Волны де Бройля.....</b>                                                  | <b>43</b>  |
| §2.1. Уравнения де Бройля. Длина волны де Бройля.....                                                           | 43         |
| §2.2. Соотношения неопределенностей Гейзенберга .....                                                           | 48         |
| §2.3. Волновая функция частицы и ее вероятностная интерпретация .....                                           | 59         |
| §2.4. Дифракция и интерференция частиц .....                                                                    | 63         |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                        | 69         |
| <b>Глава 3. Энергетические спектры атомов и молекул .....</b>                                                   | <b>71</b>  |
| §3.1. Атом водорода. Модель Резерфорда–Бора.....                                                                | 71         |
| §3.2. Многоэлектронные атомы .....                                                                              | 79         |
| §3.3. Спектральные линии атомов.....                                                                            | 80         |
| §3.4. Энергетический спектр колебательного и вращательного движения<br>молекул .....                            | 89         |
| Приложение 3.1. Квантовое состояние электрона в атоме.....                                                      | 97         |
| Приложение 3.2. Ридберговские атомы .....                                                                       | 99         |
| Приложение 3.3. Многофотонные процессы возбуждения.....                                                         | 100        |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                        | 101        |
| <b>Глава 4. Стационарные состояния квантовой частицы в одномерном<br/>потенциальном поле .....</b>              | <b>104</b> |
| §4.1. Теоретическое введение .....                                                                              | 104        |
| §4.2. Непрерывный спектр энергии .....                                                                          | 108        |
| §4.3. Дискретный энергетический спектр .....                                                                    | 129        |
| Приложение 4.1. Дискретный энергетический спектр частицы в потенциальной<br>яме конечной глубины и ширины ..... | 133        |
| Приложение 4.2. Гармонический осциллятор.....                                                                   | 144        |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                        | 150        |
| <b>Глава 5. Надбарьерное прохождение и туннельный эффект<br/>в одномерных задачах .....</b>                     | <b>153</b> |
| §5.1. Теоретическое введение .....                                                                              | 153        |
| §5.2. Надбарьерное отражение и прохождение .....                                                                | 155        |
| §5.3. Туннельный эффект: подбарьерное прохождение .....                                                         | 165        |
| §5.4. Глубокое туннелирование.....                                                                              | 168        |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                        | 177        |

|                                                                                                                      |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Глава 6. Объем квантового состояния. Плотность состояний .....                                                       | 180 |
| §6.1. Частица в одномерной потенциальной яме .....                                                                   | 180 |
| §6.2. Частица в трехмерной потенциальной яме.....                                                                    | 183 |
| §6.3. Импульс и энергия Ферми .....                                                                                  | 188 |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                             | 193 |
| Глава 7. Ансамбли квантовых частиц. Ферми- и бозе-частицы .....                                                      | 194 |
| §7.1. Статистические закономерности ансамблей частиц.....                                                            | 194 |
| §7.2 Ферми-частицы. Функция распределения Ферми–Дирака .....                                                         | 196 |
| §7.3. Бозе-частицы. Функция распределения Бозе–Эйнштейна .....                                                       | 205 |
| Приложение 7.1. Бозе-конденсация .....                                                                               | 208 |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                             | 210 |
| Глава 8. Элементы квантовой теории твердого тела. Фононы .....                                                       | 213 |
| §8.1. Колебательные движения атомов в кристалле .....                                                                | 213 |
| §8.2. Основное состояние кристаллических структур. Нулевые колебания.....                                            | 214 |
| §8.3. Возбужденное состояние кристалла. Температура Дебая .....                                                      | 215 |
| §8.4. Фононы – кванты возбуждений .....                                                                              | 217 |
| §8.5. Закон дисперсии фононов .....                                                                                  | 225 |
| §8.6. Решеточная теплоемкость .....                                                                                  | 236 |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                             | 240 |
| Глава 9. Электроны в металле .....                                                                                   | 242 |
| §9.1. Плотность состояний и плотность заполнения энергетических<br>уровней .....                                     | 242 |
| §9.2. Энергия Ферми и химический потенциал .....                                                                     | 245 |
| §9.3. Элементарные возбуждения в системе коллективизированных<br>электронов. Фермиевские электроны .....             | 247 |
| §9.4. Эффективная потенциальная энергия и волновая функция<br>электронов в кристаллической решетке. Волна Блоха..... | 251 |
| §9.5. Энергетические зоны.....                                                                                       | 257 |
| §9.6. Электропроводность металлов. Квазиклассическое описание .....                                                  | 169 |
| Приложение 9.1. Модель Лифшица .....                                                                                 | 273 |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                             | 275 |
| Глава 10. Электроны и дырки в полупроводниках .....                                                                  | 277 |
| §10.1. Зонная структура полупроводников, диэлектриков.....                                                           | 277 |
| §10.2. Концентрация носителей заряда и химический потенциал<br>в полупроводниках с собственной проводимостью .....   | 280 |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                             | 291 |
| Глава 11. Квантование энергии в магнитном поле и в тонкой пленке.....                                                | 293 |
| §11.1. Квантование магнитного потока .....                                                                           | 293 |
| 11.1.1. Канонический импульс (293)                                                                                   |     |
| 11.1.2. Магнитный поток внутри сверхпроводящей трубки (294)                                                          |     |
| §11.2. Квантование движения заряженной частицы в магнитном поле.....                                                 | 297 |
| §11.3. Квантовый размерный эффект.....                                                                               | 304 |
| Задачи для самостоятельного решения.....                                                                             | 313 |
| Литература.....                                                                                                      | 319 |



## Предисловие

Квантовая физика — широкий раздел физики, законы которой проявляются в микромире — мире частиц и объектов, имеющих размеры порядка нанометров. Поскольку свойства макроскопических тел определяются свойствами частиц, из которых они состоят, то законы квантовой физики, в конечном итоге, служат фундаментом наук о строении и свойствах веществ. «Введение в квантовую физику» — это первый шаг к открытию невидимого, но ощущаемого мира квантовых явлений, дискретности энергий и импульсов частиц.

Квантовая физика — это мир «неуловимых» частиц, чьи параметры состояния: координаты и импульс (согласно принципу неопределенности Гейзенберга) невозможно одновременно точно определить, как, например, в механике точно определяется координата и скорость тела одновременно.

В основе поведения ансамбля идентичных (тождественных) частиц лежат вероятностные (статистические) законы, которым они подчиняются. Одни «сообщества» частиц «любят» объединяться в пары (ферми-частицы), другие «любят» собираться все вместе (бозе-частицы). Квантовая физика объясняет, почему электроны в металлах имеют огромные скорости движения (всего в 100–1 000 раз меньше скорости света в вакууме) даже при температурах близких к нулю Кельвина.

При ограничении пространственной области движения частиц (при финитном движении) возникает квантование энергии, когда частица может изменять свою энергию только дискретным квантовым образом. Так происходит и в атомах, и в молекулах, где дискретные уровни энергии называются соответственно атомным и молекулярным энергетическим спектром. Переход с одного энергетического уровня на другой связан с поглощением или испусканием кванта электромагнитной энергии. Спектры поглощения и испускания индивидуальны для всех атомов и молекул.

Квантовая физика возникла на рубеже XIX и XX вв. в период динамичных перемен в физике. К концу XIX в. сформировались все основные разделы классической физики. Это были как уже давно существовавшие и общепризнанные ньютоновская механика, гидродинамика и термодинамика, так и совсем недавно возникшие разделы классической физики — максвелловская электродинамика, молекулярно-кинетическая теория и статистическая физика.

К рубежу веков только лишь были сформулированы основы максвелловской электродинамики и статистической физики в виде близком к современному виду этих разделов классической физики. И к концу XIX века удалось решить лишь минимум задач в рамках этих разделов. В это время эти теории вряд ли можно было считать общепризнанными. Немного конкретных задач удалось решить с использованием этих теорий к 1900 г.

Многие задачи классической физики, изучаемые современными студентами, были поставлены и решены позднее, — после возникновения квантовой физики.

Законы классической физики оказались не универсальными. Успешное применение классической механики в XVIII–IX вв., позволившее в рамках теории возмущений с высокой точностью рассчитать движение различных планет и комет в Солнечной системе, вдохновляло физиков в XIX веке распространять законы физики и на микромир. В середине XIX века физика вплотную подошла к необходимости объяснения свойств вещества с помощью микроскопических моделей. Актуальным стал механический анализ движения систем многих тел. Продолжением этого направления развития физики стали молекулярно-кинетическая теория и статистическая физика. Но относительно последовательное развитие физики в 1900 г. было нарушено.

В рамках возникавшей квантовой физики оказалось, что законы микромира коренным образом отличаются от макроскопических законов классической физики, действующих в обычных для человека пространственно-временных масштабах. Положение об универсальности законов в этом случае не сработало.

Открытие квантования преобразило практически все разделы физики, но все началось с исследования свойств равновесного теплового излучения.

В 1859 г. Г. Кирхгоф получил, основываясь на термодинамике и на самых общих свойствах теплового и оптического излучения (заметим, делал он это без непосредственного применения теории электромагнитного поля!), закон, утверждающий, что в тепловом равновесии отношение спектральной плотности излучающей способности тела  $I_{\text{изл}}(\lambda, T)$  к спектральной плотности поглощающей способности данного тела  $I_{\text{погл}}(\lambda, T)$

$$B(\lambda, T) = \frac{I_{\text{изл}}(\lambda, T)}{I_{\text{погл}}(\lambda, T)} \quad (1)$$

не зависит от рода вещества (здесь  $\lambda$  — длина волны излучения, а  $T$  — абсолютная температура тела). Кирхгоф также показал, что функция  $B(\lambda, T)$  пропорциональна другой функции  $u(\lambda, T)$  — *спектру излучения абсолютно черного тела*. Было также показано, что спектральная плотность энергии излучения в замкнутой изотермической полости совпадает со спектром излучения абсолютно черного тела. Функция, введенная Кирхгофом, имела фундаментальный характер и стала предметом многочисленных исследований в конце XIX века. Ряд результатов оказался достижим в рамках классической физики.

В 1879 г. на основе экспериментальных данных австрийский физик Й. Стефан пришел к выводу, что полное излучение черного тела удовлетворяет равенству

$$\int_0^{\infty} u(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4, \quad (2)$$

где  $\sigma$  — постоянная величина — т. е. изменяется пропорционально  $T^4$ . В 1884 г. это соотношение было обосновано теоретически Л. Больцманом, основывавшимся на началах термодинамики, а также использовавшим максвелловское выражение для давления электромагнитных волн.

В 1894 г. немецкий физик В. Вин, основываясь на термодинамике, электродинамике Максвелла, а также учитывая эффект Доплера, доказал, что функцию двух переменных  $u(\lambda, T)$  можно свести к функции одной переменной:

$$u(\lambda, T) = \lambda^{-5} \varphi(\lambda T), \quad (3)$$

откуда следовало, что максимум функции  $u(\lambda, T)$ , как функции  $\lambda$ , приходится на значение  $\lambda_{\text{max}} = b / T$ , где  $b = 0,294 \text{ см} \cdot \text{К}$ . Позднее закон, выражающийся формулой (3), получил название *закон смещения Вина*.

В 1897 г. к проблеме излучения черного тела обратился Макс Планк. Планк воспользовался доказанной Кирхгофом независимостью спектра черного тела от вида вещества и выбрал в качестве излучателей систему гармонических осцилляторов. Далее Планк применил теорию дипольного излучения, разработанную Г. Герцем

в 1889 г. Планк также использовал метод статистического усреднения и показал, что спектральная плотность равновесного теплового излучения  $u(\nu, T)$ , где  $\nu$  — частота излучения, однозначно связана со средней энергией гармонических осцилляторов  $U(\nu, T)$ , находящихся в равновесии с излучением при температуре  $T$ :

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} U(\nu, T), \quad (4)$$

( $c$  — скорость света в пустоте). Теперь согласно классической статистической механике, основываясь на теореме о равнораспределении энергии по степеням свободы, надо было бы положить

$$U(\nu, T) = kT. \quad (5)$$

Основываясь на результатах работ Рубенса и Курльбаума, Планк в октябре 1900 г. пересмотрел свою работу и построил интерполяционную формулу для  $u(\nu, T)$ :

$$u(\nu, T) = \frac{A\nu^3}{\exp(B\nu/T) - 1}. \quad (6)$$

Формула Планка (6) переходит в формулу Вина при  $B\nu/T \gg 1$  и соответствует результатам Рубенса и Курльбаума при  $B\nu/T \ll 1$ . Вскоре экспериментальные исследования показали очень высокую точность формулы Планка (6) во всем диапазоне частот. Точность была намного выше той, что стоило обычно ожидать от интерполяционной формулы.

В декабре 1900 г. Планк опубликовал новый вывод формулы (6). При этом он использовал метод аналогичный методу Л.Больцмана, который в 1877 г. продемонстрировал статистическую природу второго начала термодинамики в ситуации с разреженным газом. По прошествии времени внимательный анализ работы Планка показал, что он заметно отступил от метода Больцмана. Планк знал правильный ответ в задаче и не был уверен в необходимости точного следования всем нюансам больцмановского подхода. Для подсчета вероятности, действуя аналогично Больцману, Планк ввел дискретность — осцилляторы могли обмениваться лишь порциями энергии кратными некоторой постоянной величине  $\varepsilon = h\nu$ . Поразительным отличием от ситуации с больцмановским газом было то, что величина порции энергии вошла в ответ, чего не было у Больцмана. В этой работе вместо (6) Планк написал:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp(h\nu/k_B T) - 1}. \quad (7)$$

Работа Планка декабря 1900 г. знаменовала рождение квантовой физики, а константа  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с — постоянная Планка стала символом квантовой физики. Из уравнения (7) «родились» точные значения еще нескольких констант, введенных в физику также Планком. Это — постоянная Больцмана  $k_B$ , постоянная Авогадро  $N_A$  и элементарный электрический заряд  $e$ .

В том же 1900 г., но несколькими месяцами раньше в Британии появилась работа лорда Рэля, в которой на основе аналогии со стоячими звуковым была получена спектральная функция равновесного теплового излучения, которая, с учетом позднейшей поправки Джинса, имела вид

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T. \quad (8)$$

Рэлей, в отличие от Планка, при выводе формулы (8) напрямую воспользовался теоремой о равнораспределения энергии. Важно, что попытка рассчитать полную энергию излучения на основе формулы (8) приводит к бесконечному значению.

В том же 1900 г. году сначала Г.Лоренц, а затем и сам Планк пришли к необходимости пересмотра фундаментальных основ классической механики, электродинамики и молекулярно-кинетической теории для микросистем вследствие квантования, фактически введенного Планком в работе 1900 г. Окончательно родилась новая — квантовая физика.

В конце XIX–начале XX вв. был открыт ряд явлений, которые нельзя было объяснить в рамках имеющейся на тот момент на вооружении ученых классической теории.

В середине XIX в. был открыт фотоэффект — испускание электронов веществом под действием света (и, вообще говоря, любого электромагнитного излучения). Опыты по исследованию фотоэффекта позволили сформулировать его основные законы:

1. Количество электронов, вырывааемых светом с поверхности металла за единицу времени на данной частоте, прямо пропорционально световому потоку, освещающему металл.

2. Максимальная кинетическая энергия вырываемых светом электронов линейно возрастает с частотой света и не зависит от его интенсивности.

3. Для каждого вещества существует красная граница фотоэффекта, т. е. минимальная частота света  $\nu_0$  (или максимальная длина волны  $\lambda_0$ ), при которой ещё возможен фотоэффект, и если  $\nu < \nu_0$ , то фотоэффект уже не происходит.

Объяснение законов фотоэффекта было сделано Эйнштейном в 1905 г. на основании гипотезы о том, что излучение следует представить в виде потока световых квантов — фотонов, энергия которых связана с частотой соотношением  $\epsilon = \hbar\omega$ , и эта энергия целиком передается одному электрону. Эта энергия расходуется на преодоление потенциального барьера металл-вакуум, остатки ее — переходят в кинетическую энергию электрона. В своем наиболее известном представлении формула Эйнштейна выглядит следующим образом:

$$\hbar\omega = A + \frac{mv_{\max}^2}{2}, \quad (9)$$

где  $v_{\max}$  — максимальная скорость электрона.

В 1923 г. А.Комптоном было обнаружено явление изменения длины волны рентгеновского излучения вследствие упругого рассеивания его электронами. Эффект Комптона также демонстрировал «необычные» с точки зрения классической физики свойства электрона. Он стал ярким подтверждением квантово-корпускулярных свойств высокочастотного электромагнитного излучения.

Проведенные в 1913 г. немецкими физиками Дж. Франком и Г. Герцем опыты подтвердили квантовую дискретность значений, которые может иметь внутренняя энергия атомов.

В описанных выше явлениях электромагнитное излучение проявляет корпускулярные свойства. С другой стороны было замечено, что открытый в 1897 г. как частица с определённой массой и зарядом электрон, обладает волновыми свойствами. Это продемонстрировали опыты К. Дэвиссона и Л. Джермера по дифракции электронов на кристалле.

Описанные выше экспериментальные свидетельства неприменимости классической физики к микромиру, тем не менее, не превращают классическую физику в анахронизм. Но нам важно установить границы применимости классической физики. Для этого

сравним описание двух базовых объектов исследования классической и квантовой физики: материальную точку массой  $m$  и фотон частоты  $\omega$ . Движение материальной точки однозначно определяется значениями ее шести обобщенных координат  $x, y, z, p_x, p_y, p_z$ , которые могут принимать произвольные значения в зависимости от конкретного вида системы. Энергия же и импульс фотона ( $E = \hbar\omega = 2\pi c / \lambda$  и  $p = \hbar k = 2\pi \hbar / \lambda$ ) обратно пропорциональны его длине волны, которая, по сути, определяет степень локализации электромагнитной волны в пространстве координат. Чем меньше размеры волны, тем указанная локализация точнее, что, в частности, приводит к уменьшению толщины дифракционных полос. С другой стороны, уменьшение длины волны приводит к увеличению необходимых для такого фотона значений энергии и импульса, тем самым снижая степень локализации его в пространстве импульсов. Увеличение длины волны приводит, разумеется, к обратным результатам.

Важно отметить, что указанные выше соотношения для энергии и импульса, отражают корпускулярно-волновой дуализм фотонов: их левые части описывают свойства фотона как частицы, правые — волны.

Эти и подобные рассуждения приводят к принципу неопределенности, сформулированному Гейзенбергом, заключающемуся в том, что чем точнее определены координаты частицы, тем хуже точность с которой можно измерить импульс данной частицы (и наоборот). Данный принцип может быть записан в виде неравенств:  $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$ ,  $\Delta y \Delta p_y \geq \hbar$ ,  $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$ , где  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  и  $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$  определяют размеры области локализации в пространстве координат и импульсов. Соотношения Гейзенберга, фактически, определяют границу, разделяющую масштабы явлений доступных для описания классическими и квантовыми методами физики. На его основании, в частности, можно провести корректную оценку масштаба длин, характерного для микромира, например радиус атома водорода  $r = \hbar^2 / me^2 = 0,529 \cdot 10^{-8}$  см. Ниже приведены числовые значения базовых физических величин в квантовой физике.

Постоянная Планка  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с ;  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с .

Элементарный заряд  $e = 1,60 \cdot 10^{-19}$  Кл .

Масса электрона  $m=0.91 \cdot 10^{-30}$  кг.

Масса протона  $M=1,67 \cdot 10^{-27}$  кг.

Постоянная Больцмана  $k=1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К.

Скорость света  $c=3,00 \cdot 10^8$  м/с.

Гравитационная постоянная  $G=6,67 \cdot 10^{-11}$  м<sup>3</sup>/(кг·с<sup>2</sup>).

Постоянная Авогадро  $N_A=6,02 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>.

Атомная единица массы 1 а.е.м. =  $1,66 \cdot 10^{-27}$  кг.

Электрон-вольт — энергия, приобретаемая элементарным зарядом при прохождении разности потенциалов 1 В :

1 эВ =  $1,6 \cdot 10^{-19}$  Дж.

Тепловая энергия ( $T=293$  К)  $kT=0,025$  эВ =  $1/40$  эВ.

Энергия покоя электрона  $mc^2=0,51$  МэВ.

Среди приведенных констант, наиболее значимыми с точки зрения описания явлений микромира являются постоянная Планка, скорость света, а также заряд и масса электрона. По этой причине, имеет смысл выражать массу, время, длину и т.д. с помощью данных фундаментальных для микромира констант. Такая система единиц называется *Атомной системой единиц* или *системой единиц Хартри*.

— \* —

Целью «Введения в квантовую физику» как одного из разделов курса общей физики является создание определенного мировоззрения перед углубленным изучением специальных разделов физики.

В данном учебном пособии дается представление о квантовых процессах (квантовых переходах, энергетических возбуждениях квантовых систем). На ряде примеров показывается, как квантовое описание микрочастиц на микроуровне проявляется в макроскопическом масштабе в виде свойств макроскопических объектов (электропроводность металлов и полупроводников, температурные зависимости теплоемкости, теплопроводности, электропроводности веществ).

Основное внимание уделяется обучению студентов умению использовать современные теоретические представления квантовой физики для решения основных типов задач; развитию навыков самостоятельного анализа и интерпретации полученных результатов; оценке правильности полученных решений.



Отобраны стандартные задачи, на примере которых иллюстрируются основополагающие принципы квантовой физики. Задачи сопровождаются рисунками. Для закрепления навыков решения задач в конце ряда задач ставятся вопросы и приводятся задачи для самопроверки. Используется международная система единиц СИ.

В начале глав в кратком теоретическом введении акцентируется внимание на наиболее важных вводных темах квантовой физики. Приводятся формулировки законов и определений физических величин, выделяются отдельные основополагающие для решения задач теоретические выводы, принципы и концепции (в тексте они специально выделены жирным шрифтом). Формулы, используемые при решении задач, сопровождаются краткими выводами из основных законов.

Физической основой квантовой физики является принцип корпускулярно-волнового дуализма (гл. 1 и 2). В гл. 3 рассмотрены энергетические спектры атомов и молекул. Главы 4 и 5 посвящены квантовой частице, находящейся в потенциальном поле, туннелированию частиц. Ансамбли квантовых частиц: фермионы и бозоны описываются в гл. 6, 7. Кратко рассмотрены фононы (гл. 8), электроны в металле (гл. 9) и полупроводнике (гл. 10). Квантование движения в магнитном поле рассматривается в гл. 11.

Учебное пособие предназначается для студентов физических и смежных специальностей.

Авторы выражают искреннюю признательность и благодарность за полезные обсуждения и ценные замечания рецензенту профессору кафедры общей физики и молекулярной электроники Г.С.Плотникову, а также сотрудникам кафедры общей физики Л.П. Авакянцу, А.В.Быкову, П.Ю. Бокову и С.В. Колесникову за внимательное прочтение и редактирование рукописи.

За большую профессиональную работу по редактированию книги, за душевное и чуткое отношение выражаем искреннюю благодарность О.В. Салецкой.

## Глава 1

**КОРПУСКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН. ФОТОНЫ****§1.1. Корпускулярно-волновой дуализм света. Фотоны**

Опыты по интерференции, дифракции и поляризации (конец XIX века), подтверждали теорию Максвелла, установившую, что свет является электромагнитными волнами.

В то же время в 1900 г. М. Планк показал, что для объяснения закона равновесного теплового излучения необходимо предположить дискретный характер излучения в виде квантов энергии  $\hbar\omega$ , где  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  Дж·с — постоянная Планка. Используется также константа  $h = 2\pi\hbar = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с. Постоянная Планка  $\hbar$  называется также квантом действия.

Для объяснения некоторых экспериментальных данных (тепловое излучение (закон Вина) и фотоэффект), Эйнштейн выдвинул идею о том, что свет распространяется квантами и состоит из отдельных квантов, позднее названных фотонами.

Каждый фотон несет квант энергии и движется со скоростью света.

Таким образом, было установлена двойственная природа света: свет обладает как волновыми, так и корпускулярными свойствами. **Корпускулярно-волновой дуализм** является фундаментальным принципом, описывающим важнейшие свойства Природы, и применим ко всем микрообъектам.

Корпускулярные (энергия  $E_\phi$  и импульс  $\mathbf{p}_\phi$  фотона) и волновые (циклическая частота  $\omega$  и волновой вектор  $\mathbf{k}$  электромагнитной волны) характеристики света связаны между собой уравнениями:

$$\begin{cases} E_\phi = \hbar\omega, \\ \mathbf{p}_\phi = \hbar\mathbf{k}, \end{cases} \quad (1.1)$$

Постоянная Планка играет фундаментальную роль во всех квантовых явлениях. Постоянная Планка имеет и оценочную роль в разграничении областей применимости классической и квантовой физики. Если в условиях данной задачи физические величины раз-

мерности действия [Дж·с] значительно больше  $\hbar$ , то применима классическая механика.

Все фотоны двигаются с одной и той же скоростью. В вакууме эта скорость равна  $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = 3 \cdot 10^8$  м/с. В диэлектрической немагнитной среде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$  скорость движения фотонов

$$c_\epsilon = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}}. \quad (1.2)$$

Фотоны являются *релятивистскими* частицами.

**Закон дисперсии фотонов** (дисперсионное соотношение) линейный:

$$E_\phi = cp_\phi \quad (1.3)$$

или

$$\omega = ck. \quad (1.4)$$

Дисперсионное уравнение (1.4) связывает независимые уравнения (1.1) и позволяет выразить частоту и энергию фотона через длину волны света. Так как  $k = 2\pi/\lambda$ , то

$$\omega = ck = c \cdot 2\pi/\lambda \quad (1.5)$$

и

$$E_\phi = \hbar\omega = \hbar c \cdot 2\pi/\lambda. \quad (1.6)$$

В отличие от фотонов, дисперсия которых подчиняется линейному закону, закон дисперсии свободной релятивистской частицы

$$p = \sqrt{E^2/c^2 - m^2 c^2}. \quad (1.7)$$

Электрическое **E** и магнитное **H** поля существуют в каждой точке пространства, где распространяется электромагнитная волна. Поэтому энергия, плотность потока которой характеризуется вектором Умова–Пойнтинга  $\mathbf{S} = [\mathbf{E}\mathbf{H}]$ , также непрерывно распределена в пространстве и непрерывно же изменяется во времени.

Частота и волновой вектор уравнения плоской электромагнитной волны  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{x})$  связаны уравнениями (1.1) с параметрами фотонов (энергией  $E_\phi$  и импульсом  $p_\phi$ ) в квантовой тео-

рии. С какими параметрами, используемыми в квантовой теории, связана амплитуда волны  $\mathcal{E}_0$ ?

Амплитуда волны  $\mathcal{E}_0$  связана с плотностью энергии электромагнитного поля  $\varpi$  :

$$\varpi = \varepsilon \varepsilon_0 \mathcal{E}^2, \quad (1.8)$$

а интенсивность волны — с ее средним значением  $\langle \varpi \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon \varepsilon_0 \mathcal{E}_0^2$  :

$$I = \langle \varpi \rangle \cdot c = \frac{1}{2} \varepsilon \varepsilon_0 \mathcal{E}_0^2 \cdot c. \quad (1.9)$$

В корпускулярной теории поток энергии, проходящей за время  $dt$  через сечение площадью  $\Sigma$ , равен энергии фотонов, заключенных в объеме  $\Sigma \cdot c dt$ . Чтобы вычислить эту энергию, приходится ввести еще одну характеристику — концентрацию фотонов  $n_\phi$  (число фотонов, приходящихся на единицу объема  $V = 1 \text{ м}^3$  электромагнитного поля). Тогда энергия фотонов в объеме  $(c dt \Sigma)$

$$E_\phi = n_\phi \cdot \hbar \omega \cdot (c dt \Sigma), \quad (1.10)$$

а плотность энергии

$$\varpi = n_\phi \hbar \omega, \quad (1.11)$$

и интенсивность волны (средняя плотность потока энергии)

$$I = \frac{E_\phi}{\Sigma dt} = n_\phi \hbar \omega \cdot c. \quad (1.12)$$

Сравнивая (1.8) и (1.11), видим, что плотность энергии с одной стороны (волновой), пропорциональна квадрату амплитуды, а с другой стороны (корпускулярной) — концентрации фотонов:

$$\langle \varpi \rangle = \frac{1}{2} \varepsilon \varepsilon_0 \mathcal{E}_0^2 = n_\phi \hbar \omega. \quad (1.13)$$

При неизменной частоте источника и увеличении его мощности, например, в два раза, амплитуды напряженностей электрического и магнитного полей возрастают в  $\sqrt{2}$  раз (волновое описание), и в два раза возрастает средняя концентрация фотонов (корпускулярное описание).

Аналогично (1.10)–(1.12) находим импульс фотонов, заключенных в объеме  $(c dt \Sigma)$  :

$$p_{\Sigma\Phi} = n_{\Phi} \cdot \frac{\hbar\omega}{c} \cdot (cdt\Sigma) , \quad (1.14)$$

где  $\hbar\omega/c = \hbar k = p_{\Phi}$  — импульс одного фотона (см. (1.2) и (1.4));  
и среднюю плотность потока импульса:

$$\frac{p_{\Sigma\Phi}}{dt\Sigma} = n_{\Phi} \hbar\omega = \langle \varpi \rangle = \frac{I}{c} . \quad (1.15)$$

В табл. 1.1 приведены соотношения характеристик, используемые для описания света в корпускулярной и волновой моделях.

Таблица 1.1

**Основные характеристики света, их соотношения в рамках волновой и корпускулярной моделей**

| <b>Свет</b>                                                                                                                                                              |                                                  |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|
| <i>Волновая теория</i>                                                                                                                                                   | <i>Корпускулярная теория</i>                     |
| $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t - kx)$<br>$B = B_0 \cos(\omega t - kx)$<br>$\mathcal{E} = cB$ , $[\mathbf{E} / \mathcal{E}, \mathbf{B} / B] = \mathbf{k} / k$ | $E_{\Phi} = \hbar\omega$<br>$p_{\Phi} = \hbar k$ |
| <b>Закон дисперсии</b>                                                                                                                                                   |                                                  |
| $\omega = ck$                                                                                                                                                            | $E_{\Phi} = cp$                                  |
| <b>Средняя плотность энергии</b>                                                                                                                                         |                                                  |
| $\langle \varpi \rangle = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{2} \mathcal{E}_0^2$                                                                                            | $\langle \varpi \rangle = n_{\Phi} \hbar\omega$  |
| <b>Интенсивность (средняя плотность потока энергии) <math>I = c \langle \varpi \rangle</math></b>                                                                        |                                                  |
| $I = c \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{2} \mathcal{E}_0^2$                                                                                                               | $I = cn_{\Phi} \hbar\omega$                      |
| <b>Средняя плотность потока импульса</b>                                                                                                                                 |                                                  |
| $I / c$                                                                                                                                                                  | $cn_{\Phi} \hbar k$                              |

**Задача 1.1.** Длины волн видимой части спектра расположены в пределах от  $\lambda = 0,4$  до  $\lambda = 0,75$  мкм. В каких пределах заключены энергии квантов видимого света? Какой скоростью  $v_e$  должен обладать электрон, чтобы его кинетическая энергия была равна энергии фотона видимого света?

**Решение.** Энергию фотона выразим через длину волны:  $E_{\phi} = \hbar c (2\pi/\lambda)$  (см. (1.6)). При заданном в задаче интервале изменения длин волн энергия фотонов лежит в пределах

$$\frac{2\pi \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{0,75 \cdot 10^{-6}} = 2,5 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} < E_{\phi} < \frac{2\pi \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{0,4 \cdot 10^{-6}} = 4,7 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}. \quad (1.16)$$

Для столь малых значений энергии принято использовать единицу энергии электрон-вольт:

$$1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}. \quad (1.17)$$

Тогда для энергии фотонов видимого света имеем  $1,6 \text{ эВ} < E_{\phi} < 3,2 \text{ эВ}$  (рис. 1.1).

При равенстве кинетической энергии электрона энергии фотона, его скорость равна  $v_e = \sqrt{2E_{\phi}/m}$ , где  $m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$  – масса свободного электрона. Интервалу энергий (1.16) соответствует интервал скоростей для электрона (см. рис. 1.1)

$$0,73 \cdot 10^6 \text{ м/с} < v_e < 1,0 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

Верхняя предельная скорость электрона в 300 раз меньше скорости фотонов.

**Ответ.**  $1,6 \text{ эВ} < E_{\phi} < 3,2 \text{ эВ}$ ,  $0,73 \cdot 10^6 \text{ м/с} < v_e < 1,0 \cdot 10^6 \text{ м/с}$ .

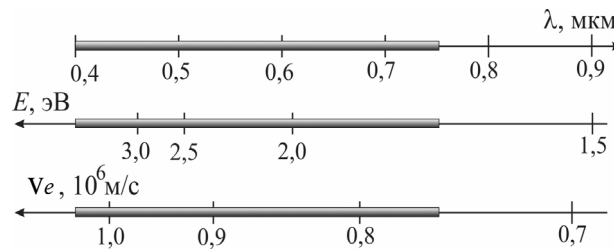


Рис. 1.1. Диапазон длин волн  $\lambda$  и энергии  $E_{\phi}$  фотонов соответствующий видимой области спектра. Скорости  $v$  электронов, обладающих энергией, равной энергии фотонов.

**Задача 1.2.** Интенсивность светового потока от Солнца на Земле в полдень составляет около  $I = 1,3 \text{ кВт/м}^2$ . Считая свет моно-

хроматическим с длиной волны  $\lambda = 0,6$  мкм, определить концентрацию фотонов у поверхности Земли.

**Решение.** Из формулы для интенсивности (1.12) с учетом (1.5) находим

$$n_{\phi} = \frac{I}{c\hbar\omega} = \frac{I\lambda}{2\pi\hbar c^2} = \frac{1,3 \cdot 10^3 \cdot 0,6 \cdot 10^{-6}}{2\pi \cdot 10^{-34} \cdot (3 \cdot 10^8)^2} \approx 1,3 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-3} = 1,3 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3} =$$

$$= 13 \text{ млн фотонов в см}^3.$$

**Ответ:**  $n_{\phi} = \frac{I\lambda}{hc^2} = 1,3 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-3}.$

**Задача 1.3.** Какой скоростью  $v_e$  должен обладать электрон, чтобы иметь такой же импульс, как и фотон с  $\lambda = 0,1$  нм?

**Решение.** Импульс фотона равен  $p_{\phi} = h/\lambda$ , релятивистский

импульс электрона –  $p_e = \frac{mv_e}{\sqrt{1-v_e^2/c^2}}$ . Из записанных соотноше-

ний, с учетом условия задачи  $p_{\phi} = p_e$  получаем

$$v_e = \frac{p_{\phi}}{\sqrt{m^2 + (p_{\phi}/c)^2}} = \frac{c}{\sqrt{1 + (\lambda mc/h)^2}} =$$

$$= \frac{3 \cdot 10^8}{\sqrt{1 + (0,1 \cdot 10^{-9} \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 3 \cdot 10^8 / (6,6 \cdot 10^{-34}))^2}} \approx 7 \cdot 10^6 \text{ м/с} \approx \frac{c}{40}.$$

**Ответ.**  $v_e = \frac{c}{\sqrt{1 + (\lambda mc/h)^2}} \approx 7 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$

## §1.2. Работа выхода. Внешний фотоэффект и его законы

Рассмотрим кристаллический металл. В узлах кристаллической решетки находятся атомы металла. Каждый атом отдает свои валентные электроны «в общее пользование», превращаясь в положительно заряженный ион. Валентные электроны могут перемещаться по всему объему металла. Таким образом, каждый валентный электрон электрически взаимодействует сразу со всеми иона-

ми кристаллической решетки металла (их концентрация очень велика: порядка  $10^{23} \text{ см}^{-3}$ ). Однако, чем дальше электрон от какого-либо иона, тем слабее к нему притяжение.

Благодаря силам притяжения электрона ко всем ионам решетки, электрон остается в объеме металла, как в потенциальном ящике. Следует отметить, что силы отталкивания отдельного электрона от всех других свободных электронов металла ослабляют результирующую силу притяжения, уменьшают глубину потенциальной ямы. Глубина потенциальной ямы  $U_0$  различна для разных металлов и определяет ту *минимальную* энергию, которую необходимо сообщить электрону, чтобы он покинул металл и стал «по-настоящему» свободным. Эта энергия называется работой выхода  $\Delta A_{\text{вых}}$ .

Как можно сообщить электрону энергию, равную работе выхода?

Это можно сделать, например, нагревая металл. При определенных температурах наблюдается эмиссия электронов. Это явление называется **термоэлектронной эмиссией**, а вышедшие электроны — **термоэлектронами**.

Другой способ высвобождения электронов из металла — внешний фотоэффект.

**Фотоэффект** — испускание электронов твердыми телами (или жидкостями) при поглощении фотонов. При этом энергия фотонов передается электронам вещества (**фотокатода**), так что электроны приобретают возможность покинуть фотокатод (**внешний фотоэффект**).

Пусть на поверхность металла падает свет. Рассмотрим следующую *модель внешнего фотоэффекта*. Каждый падающий на металл фотон поглощается одним электроном, находящийся вблизи поверхности. Если энергия фотона удовлетворяет соотношению  $\hbar\omega \geq \Delta A_{\text{вых}}$ , то электрон вырывается из металла. Излишек энергии фотона переходит в кинетическую энергию электрона, максимальное значение которой  $E_{\text{макс}}$  линейно возрастает с частотой падающего света:

$$\hbar\omega - \Delta A_{\text{вых}} = E_{\text{макс}}. \quad (1.18)$$

Полученное соотношение называется **уравнением Эйнштейна**.

Выбитые фотонами электроны (фотоэлектроны) образуют вблизи поверхности металла электронное облако. Электроны в об-



лаке в общем случае имеют скорости, направленные в разные стороны. Для регистрации фотоэлектронов необходимо создать поблизости на другом металлическом электроде (**аноде**) положительный потенциал относительно фотокатода. Тогда выбитые электроны приобретают дополнительную скорость движения в направлении к аноду (рис. 1.2), т.е. течет электрический ток — **фототок**, который можно зафиксировать амперметром (гальванометром Г).

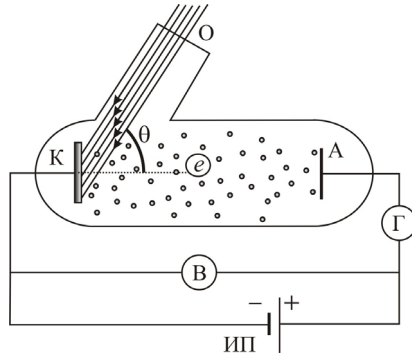


Рис. 1.2. В сосуде воздух откачан до состояния вакуума. Два электрода А (анод) и К (катод) подключены к источнику питания ИП. Для измерения силы тока используется гальванометр Г, а напряжения — вольтметр В. Через окно О пучок света падает на поверхность катода К под углом  $\theta$  к нормали.

Из уравнения Эйнштейна следует, что работа выхода определяет минимально возможную частоту света  $\hbar\omega_{\min} = \Delta A_{\text{вых}}$ , при которой фотоэффект наблюдается (**I закон фотоэффекта**).

Поскольку работа выхода — характеристика вещества катода, то из (1.18) следует также, что максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов у поверхности катода линейно зависит от частоты падающего света и не зависит от интенсивности падающего света (**II закон фотоэффекта**).

Даже при отсутствии разности потенциалов между катодом и анодом, некоторое количество электронов, чьи скорости направлены к аноду, попадают на анод, создавая ток  $J(0)$ . С ростом по модулю отрицательного напряжения  $V < 0$  (при отталкивающем потенциале) сила тока уменьшается, достигая нуля при напряжении  $V = V_0 < 0$ , называемом **запирающим напряжением**. При  $V > 0$  сила фототока растет:  $J > J(0)$ , и стремится к насыщению  $J \rightarrow J_{\text{нас}}$ . Насыщение достигается тогда, когда все выбиваемые фотоэлектроны попадают на анод (рис. 1.3).

Вычислим силу тока насыщения и определим, от каких параметров зависит его величина. Число  $dN_e$  выбитых электронов за время  $dt$  равно числу  $dN_{\phi}$  падающих фотонов за то же время. Ес-

ли поток фотонов направлен под углом  $\theta$  к нормали поверхности металла, то  $dN_{\phi} = n_{\phi} \cdot (\Sigma c dt \cos \theta)$  и

$$dN_e = n_{\phi} c (\Sigma \cos \theta) dt, \quad (1.19)$$

где  $\Sigma$  — площадь освещаемой поверхности,  $(\Sigma c dt \cos \theta)$  — объем светового пучка, фотоны которого достигают катода за время  $dt$ . В режиме насыщения все  $dN_e$  достигают анода. Причем, учитывая непрерывность электрического тока,  $dN_e$  электронов поступают на анод каждые  $dt$  секунд. Таким образом, сила фототока насыщения равна

$$J_{\text{ф нас}} = \frac{dq}{dt} = \frac{e \cdot dN_e}{dt} = e n_{\phi} c \Sigma \cos \theta \quad (1.20)$$

или, учитывая (1.12),

$$J_{\text{ф нас}} = \frac{e}{\hbar \omega} (I \cdot \Sigma \cos \theta). \quad (1.21)$$

Выражение в скобках  $(I \cdot \Sigma \cos \theta)$  — поток световой энергии, падающий на поверхность с площадью  $\Sigma$  под углом  $\theta$  к нормали поверхности.

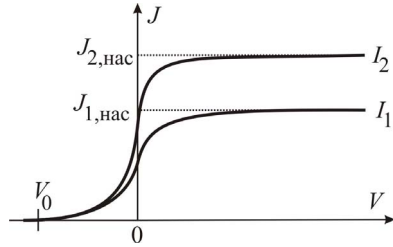


Рис. 1.3. Зависимость силы фототока  $J$  от разности потенциалов  $V$  между анодом и катодом фотоэлемента при интенсивностях падающего света  $I_1$  и  $I_2$  ( $I_2 > I_1$ ).

Таким образом, сила фототока насыщения  $J_{\text{ф нас}}$  пропорциональна интенсивности  $I$  падающего света и не зависит от материала катода (**II закон фотоэффекта**).

С увеличением интенсивности света фототок насыщения увеличивается и достигаться он будет при бо'льших значениях напряжения.

Итак, сформулируем все **три закона фотоэффекта**:

1. Существует **красная граница фотоэффекта** – граничная частота  $\omega_{\min}$ , ниже которой для данного материала фотоэффект отсутствует:  $\hbar\omega_{\min} = \Delta A_{\text{вых}}$ .

2. С увеличением напряжения на фотоэлементе сила фототока  $J$  достигает насыщения. Значение силы тока насыщения  $J_{\text{ф нас}}$  при фиксированной частоте падающего света прямо пропорционально его интенсивности  $I$ :  $J_{\text{ф нас}} = (e/\hbar\omega)(I \cdot \Sigma \cos \theta)$ .

3. Максимальная кинетическая энергия фотоэлектронов у поверхности катода линейно зависит от частоты падающего света и не зависит от интенсивности падающего света:  $E_{\max} = \hbar\omega - \Delta A_{\text{вых}}$ .

Важной особенностью фотоэффекта является его практическая безынерционность – время запаздывания фототока не превышает  $10^{-9}$  с.

**Задача 1.4.** В вакуумном фотоэлементе сила фототока при насыщении достигает значения  $J_{\text{нас}} = 2 \cdot 10^{-10}$  А. Оценить число  $N$  электронов, выбиваемых светом из катода фотоэлемента за одну секунду.

**Решение.** При насыщении фототока все электроны, вырванные из катода, попадают на анод. Поэтому число электронов  $\Delta N$ , покидающих катод за 1 секунду, равно отношению величины силы фототока к заряду электрона  $N = J/e$  и в численном выражении:

$$N = \frac{J_{\text{нас}}}{e} = \frac{2 \cdot 10^{-10}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \approx 1,2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}.$$

**Ответ.**  $N = 1,2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ .

**Задача 1.5.** При освещении катода, изготовленного из лития, монохроматическим светом максимальная скорость фотоэлектронов оказалась равной  $v_{\max} = 5,5 \cdot 10^5$  м/с. Работа выхода электрона из лития составляет  $\Delta A_{\text{вых}} = 2,38$  эВ. Определить длину волны света, применявшегося для освещения катода.

**Решение.** Подставим значение энергии фотона  $\hbar\omega = \hbar c(2\pi/\lambda)$  (1.6) в уравнение Эйнштейна (1.18), которое с учетом нерелятивистского значения скорости фотоэлектронов (см. задачу 1.1) записы-

вается в виде  $\hbar\omega = \Delta A_{\text{вых}} + \frac{mv_{\text{max}}^2}{2}$ . Тогда  $\frac{hc}{\lambda} = \Delta A_{\text{вых}} + \frac{mv_{\text{max}}^2}{2}$  и

$$\lambda = \frac{hc}{mv_{\text{max}}^2 / 2 + \Delta A_{\text{вых}}}.$$

Учитывая, что работа выхода  $\Delta A_{\text{вых}} = 2,38 \text{ В} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} = 3,80 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ , получаем

$$\lambda = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot (5,5 \cdot 10^5)^2 / 2 + 3,8 \cdot 10^{-19}} \approx 3,8 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 380 \text{ нм},$$

то есть используется видимый свет фиолетового цвета.

**Ответ.**  $\lambda = \frac{hc}{mv_{\text{max}}^2 / 2 + \Delta A_{\text{вых}}} \approx 380 \text{ нм}.$

### §1.3. Обратный фотоэффект. Тормозное рентгеновское излучение

**Задача 1.6.** Медь, для которой работа выхода  $\Delta A_{\text{вых}} = 4,4 \text{ эВ}$ , облучается пучком электронов, предварительно ускоренных разностью потенциалов  $V = 25 \text{ кВ}$ . Определить минимальную длину волны возникающего рентгеновского излучения.

**Решение.** Ситуация, описанная в условии задачи, может рассматриваться как **обратный фотоэффект**, т. е. процесс взаимодействия электронов с веществом, в результате которого электроны поглощаются веществом, а их энергия передается излучаемым в данном процессе фотонам. К обратному фотоэффекту также применимо уравнение Эйнштейна (1.18):

$$E_e + \Delta A_{\text{вых}} = \hbar\omega_{\text{max}}, \quad (1.22)$$

где  $E_e = eV$  — максимальная кинетическая энергия электрона,  $\omega_{\text{max}}$  — максимальная частота возникающего излучения.

По условию задачи  $E_e = eV = 25 \text{ кэВ} \gg \Delta A_{\text{вых}} = 4,4 \text{ эВ}$ . Заметим, что работа выхода у большинства металлов имеет тот же порядок величины, что и у меди. Из уравнения (1.22) следует, что  $\hbar\omega_{\text{max}} \gg \Delta A_{\text{вых}}$ . Пренебрегая величиной  $\Delta A_{\text{вых}}$ , из уравнения Эйнштейна получаем:

$$E_e = \hbar\omega_{\max}. \quad (1.23)$$

Поскольку  $\omega = c2\pi/\lambda$ , то  $\lambda_{\min} = \frac{2\pi c}{\omega_{\max}}$ . С учетом (1.23)

$$\lambda_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{E_e} = \frac{2\pi\hbar c}{eV} = \frac{2\pi \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 25 \cdot 10^3} \approx 0,5 \cdot 10^{-11} \text{ м}.$$

**Ответ.**  $\lambda_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{eU} \approx 0,5 \cdot 10^{-11} \text{ м} = 0,05 \text{ \AA}.$

#### §1.4. Давление света

**Задача 1.7.** Свет в виде плоской волны, имеющей интенсивность  $I$  падает из вакуума под углом  $\theta$  на отражающую поверхность. Коэффициент отражения по энергии равен  $R$ . Определить давление, оказываемое светом на поверхность, а также силу, действующую по касательной к поверхности. Площадь поверхности  $\Sigma$ .

**Решение.** Коэффициентом отражения по энергии  $R$  называется отношение интенсивности отраженной волны к интенсивности падающей волны:  $R = I_{\text{отр}} / I$ . Таким образом, отраженная волна переносит меньше энергии, чем падающая. Часть энергии падающей волны, равная разности энергий падающей и отраженной волн, поглощается поверхностью.

Для решения удобно использовать следующую схему рассмотрения взаимодействия света с поверхностью: сначала считать, что весь падающий свет с интенсивностью  $I$  поглощается поверхностью, а затем свет с интенсивностью  $IR$  излучается в направлении, предписываемом законом отражения света.

**Давление** — это нормальная составляющая силы, действующей на единицу площади поверхности:  $P = F_n / \Sigma$ . Сила, действующая на поверхность, по II закону Ньютона равна  $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$ , где  $d\mathbf{p}$  — импульс, получаемый поверхностью вещества за время  $dt$ . Этот импульс равен импульсу поглощаемых фотонов, взятому со знаком «+» (на первом этапе), и импульсу испускаемых фотонов, взятому со знаком «−» (на втором этапе).

**1. Полное поглощение света с интенсивностью  $I$ .** За время  $dt$  поверхностью с площадью  $\Sigma$  поглощаются все фотоны  $dN_\Phi$ , находящиеся в объеме  $dV = cdt\Sigma \cos \theta$ :

$$dN_\Phi = n_\Phi c(\Sigma \cos \theta)dt; \quad (1.24)$$

и несущие импульс

$$dp_\Phi = dN_\Phi \cdot p_\Phi = [n_\Phi c(\Sigma \cos \theta)dt] \cdot \left[ \frac{\hbar \omega}{c} \right] = n_\Phi \hbar \omega \Sigma \cos \theta dt. \quad (1.25)$$

Учтем, что импульс фотонов направлен под углом  $\theta$ . Тогда нормальная составляющая силы

$$(F_n)_{\text{погл}} = \frac{dp_\Phi \cos \theta}{dt} = n_\Phi \hbar \omega \Sigma \cos^2 \theta, \quad (1.26)$$

тангенциальная составляющая силы

$$(dF_\tau)_{\text{погл}} = \frac{dp_\Phi \sin \theta}{dt} = n_\Phi \hbar \omega \Sigma \cos \theta \cdot \sin \theta, \quad (1.27)$$

и давление (с учетом формулы (1.12))

$$P_{\text{погл}} = \frac{dF_n}{\Sigma} = n_\Phi \hbar \omega \cos^2 \theta = \frac{I}{c} \cos^2 \theta. \quad (1.28)$$

**2. Излучение света с интенсивностью  $IR$ .** Вычисление силы, действующей на площадку со стороны отраженного света, проводится аналогично. При этом в формулах (1.26) и (1.27) следует произвести замену  $I \rightarrow IR$  и учесть изменение знака у тангенциальной составляющей силы:

$$(F_n)_{\text{отр}} = R \frac{dp_\Phi \cos \theta}{dt} = R n_\Phi \hbar \omega \Sigma \cos^2 \theta, \quad (1.29)$$

$$(F_\tau)_{\text{отр}} = -R \frac{dp_\Phi \sin \theta}{dt} = -R n_\Phi \hbar \omega \Sigma \cos \theta \cdot \sin \theta. \quad (1.30)$$

И давление, создаваемое при отражении фотонов, равно

$$P_{\text{отр}} = \frac{IR}{c} \cos^2 \theta. \quad (1.31)$$

Объединяя соотношения (1.28) и (1.31), находим полное давление:

$$P = P_{\text{погл}} + P_{\text{отр}} = \frac{I(1+R)}{c} \cos^2 \theta = \varpi(1+R) \cos^2 \theta, \quad (1.32)$$

и полную тангенциальную составляющую силы:

$$F_{\tau} = (F_{\tau})_{\text{погл}} + (F_{\tau})_{\text{отр}} = \varpi(1-R) \sin \theta \cos \theta \Sigma. \quad (1.33)$$

### Частные случаи

1) Давление при зеркальном отражении (рис. 1.4), когда  $R=1$ :

$$P = \frac{2I}{c} \cos^2 \theta = 2\varpi \cos^2 \theta \quad (1.34)$$

и  $F_{\tau} = 0$ .

2) Давление при нормальном падении и отражении с коэффициентом  $R$  (по интенсивности)

$$P = \frac{I(1+R)}{c} = \varpi(1+R) \quad (1.35)$$

и также

$$F_{\tau} = 0.$$

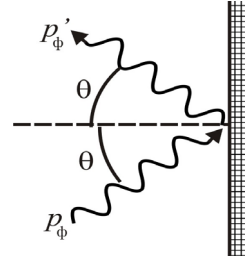


Рис. 1.4. Отражение фотона от зеркальной поверхности: угол отражения равен углу падения  $\theta$ , величина импульса фотона не изменяется.

**Задача 1.8.** Плоская волна падает на зеркально отражающий шар. Интенсивность волны  $I$ . Радиус шара  $R$ . Определить силу давления на шар.

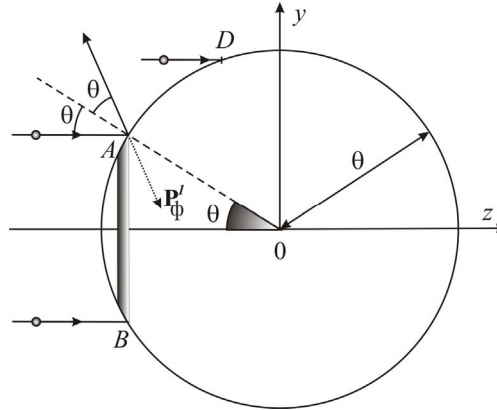


Рис. 1.5. Отражение фотонов от зеркальной сферической поверхности шара.

**Решение.** Используем схему рассмотрения взаимодействия света с поверхностью, описанную в предыдущей задаче.

**1. Поглощение света.** За время  $dt$  шаром поглощаются все фотоны из объема  $(cdt\pi R^2)$ , суммарный импульс которых равен  $p_\phi n_\phi (cdt\pi R^2)$  и направлен вдоль оси  $OZ$  (рис. 1.5).

Учитывая, что  $p_\phi = \hbar\omega/c$ , а  $I = cn_\phi\hbar\omega$ , получаем

$$\mathbf{F}_{\text{погл}} = \hbar\omega n_\phi \pi R^2 \mathbf{e}_z = \frac{\pi R^2 I}{c} \mathbf{e}_z.$$

**2. Излучение света.** Рассмотрим фотоны, излучаемые из точки  $A$  (рис. 1.5). Каждый фотон при излучении передает импульс  $\mathbf{p}'_\phi$  шару (см. рис. 1.5). Сила, действующая от излучаемых из точки  $A$  фотонами имеет как  $z$ -, так и  $y$ -компоненты. Однако, при сложении сил, действующих в симметрично расположенных точках (точках  $B$  и  $A$ ),  $y$ -составляющие взаимно компенсируются.

При излучении под углом  $\theta$  с поверхности кольца (затемнено на рис. 1.5), имеющего площадь  $d\Sigma = 2\pi(R \sin \theta)Rd\theta$ , за время  $dt$  уносится импульс

$$\begin{aligned} dp_{\Sigma\phi} &= n_\phi p_\phi (c \cos \theta dt d\Sigma) = n_\phi \frac{\hbar\omega}{c} (c \cos \theta dt \cdot 2\pi R^2 \sin \theta d\theta) = \\ &= \frac{I}{c} \pi R^2 \sin 2\theta d\theta dt. \end{aligned}$$

Составляющая силы вдоль оси  $OZ$

$$(dF_{\text{изл}})_z = \frac{(dp_{\Sigma\phi})_z}{dt} = \frac{I}{c} \pi R^2 \sin 2\theta d\theta \cdot \cos 2\theta.$$

Полная сила, действующая на шар при излучении,

$$(F_{\text{изл}})_z = \int_0^{\pi/2} (dF_{\text{изл}})_z = \frac{I}{2c} \pi R^2 \int_0^{\pi/2} \sin 4\theta d\theta = 0.$$

Почему при излучении сила равна нулю? Сравните  $F_z$  в точках  $A$  и  $D$ .

Таким образом, результирующая сила, действующая на шар, связана только с поглощением света и равна

$$F_z = \frac{I}{c} \pi R^2.$$



**Замечание.** При решении задачи можно было воспользоваться тем фактом, что в случае зеркального отражения от поверхности сила, с которой излучение воздействует на поверхность, направлена строго по нормали к поверхности.

Тогда давление в точке  $A$  согласно (1.33) будет  $P(\theta) = \frac{2I}{c} \cos^2 \theta$ , а  $z$ -составляющая силы  $dF_z$ , действующей на колечко с площадью  $d\Sigma = 2\pi(R \sin \theta)Rd\theta$ , равна

$$dF_z = Pd\Sigma \cos \theta = \frac{2I}{c} \cos^3 \theta \cdot 2\pi R^2 \sin \theta d\theta = 4\pi R^2 \frac{I}{c} \cos^3 \theta d\theta.$$

Результирующая сила

$$F_z = \int_0^{\pi/2} \frac{2I}{c} 2\pi R^2 \cos^3 \theta \sin \theta d\theta = \frac{I}{c} \pi R^2.$$

**Ответ.**  $F_z = \pi R^2 I / c$ .

**Вопрос для самопроверки.** Одинаковое ли давление в любой точке поверхности шара?

**Ответ.** Нет. Давление изменяется от 0 при  $\theta = \pi/2$  до  $2I/c$  при  $\theta = 0$  (см. (1.34)).

### §1.5. Излучение абсолютно черного тела

**Задача 1.9.** В замкнутой полости, стенки которой поддерживаются при постоянной температуре, устанавливается равновесное излучение, называемое **излучением абсолютно черного тела**. Равновесное излучение представляет собой совокупность фотонов (**фотонный газ**), движущихся в полости без столкновения друг с другом, поглощаемых стенкой полости и отражающихся от нее в том же количестве. Обладая импульсом, фотон (как и любая частица) при ударе о площадку и последующем отражении от нее оказывает на площадку давление.

Покажите, что при идеальном излучении, когда потоки энергии и импульса равномерно распределены по всем направлениям, оказываемое на поверхность давление равно одной трети от объемной плотности световой энергии  $\varpi$  (энергии, заключенной в единице объема  $\varpi = E/V$ ):

$$P = \frac{1}{3} \varpi. \quad (1.36)$$

**Решение.** Выделим на поверхности замкнутой полости элементарную площадку с бесконечно малой площадью  $d\Sigma$  (рис. 1.6а). В течение времени  $dt$  о данную площадку могут удариться только фотоны, находящиеся внутри объема, ограниченного полусферой с радиусом  $cdt$ . Рассмотрим небольшой объем в виде узкого слоя на поверхности данной полусферы (затемнен на рис. 1.6 а), который расположен под углами  $\varphi$  и  $\theta$  относительно площадки  $d\Sigma$ .

Скорости фотонов, находящихся в выделенном объеме, направлены изотропно по всем направлениям. На площадку  $d\Sigma$  попадут лишь те фотоны, векторы скоростей которых расположены в телесном угле  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ . Отсюда следует, что доля частиц из рассматриваемого объема, направляющихся под углом  $\theta$  к площадке, составляет  $d\Omega/4\pi$ . Другими словами, концентрация фотонов, движущихся в направлении  $(\theta, \varphi)$ , равна

$$\delta n_{\theta, \varphi} = n \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{n}{4\pi} \sin\theta d\theta d\varphi, \quad (1.37)$$

где  $n$  – полная концентрация фотонов (одинаковая в любой точке полости).

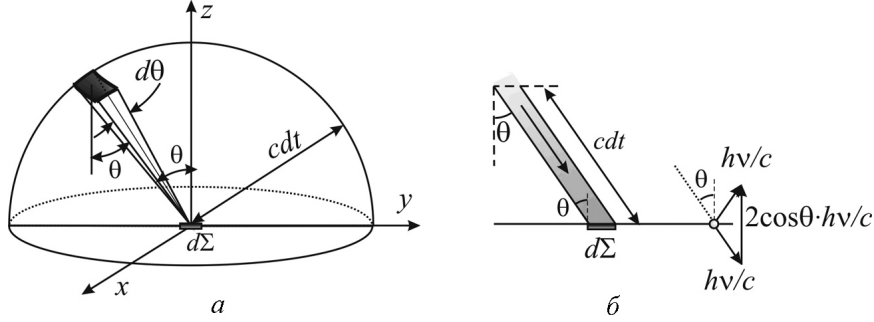


Рис. 1.6. К вычислению числа фотонов, ударяющихся о площадку  $d\Sigma$  за время  $dt$ , и импульса, передаваемого фотонами площадке.

Рассмотрим поток фотонов к площадке в направлении  $(\theta, \varphi)$  (см. рис. 1.6б). Концентрация этих фотонов описывается формулой (1.37). За время  $dt$  площадки достигнут фотоны, находящиеся в объеме

$$dV = d\Sigma \cdot c dt \cos \theta . \quad (1.38)$$

Число фотонов с заданным направлением  $(\theta, \varphi)$  импульса, удаляющихся о площадку за время  $dt$ :

$$dN_{\theta, \varphi} = \delta n_{\theta, \varphi} dV . \quad (1.39)$$

Каждый из попадающих под углом  $\theta$  на площадку фотонов упруго отражается и передает площадке импульс, равный по модулю изменению импульса фотона

$$2h\nu \cos \theta / c . \quad (1.40)$$

Получаемый площадкой за время  $dt$  импульс  $dp_{\theta, \varphi}$  от фотонов, имеющих направление движения  $(\theta, \varphi)$ , равен

$$dp_{\theta, \varphi} = 2 \frac{h\nu}{c} \cos \theta \cdot dN_{\theta, \varphi} . \quad (1.41)$$

Оказываемое ими давление на площадку

$$dP_{\theta, \varphi} = \frac{dp_{\theta, \varphi}}{dt \cdot d\Sigma} . \quad (1.42)$$

С учетом формул (1.37)–(1.41) выражение (1.42) принимает вид

$$dP_{\theta, \varphi} = \frac{nh\nu}{2\pi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\varphi . \quad (1.43)$$

Учитывая возможные направления движения фотонов  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  и  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , окончательно находим

$$P = \int dP_{\theta, \varphi} = \frac{nh}{2\pi} \nu \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{1}{3} nh\nu . \quad (1.44)$$

Поскольку  $nh\nu = \varpi$  – плотность энергии фотонного газа, то получаем

$$P = \frac{1}{3} \varpi .$$

### Замечания

1. Плотность энергии равновесного излучения  $\varpi$  зависит от температуры:

$$\varpi = \sigma_c T^4 . \quad (1.45)$$

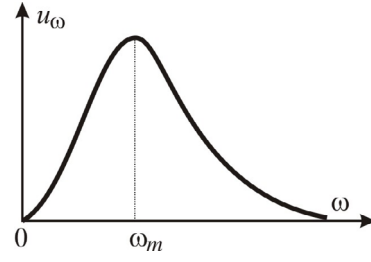


Рис. 1.7. Зависимость от частоты спектральной плотности излучения  $u_\omega = \varpi_\omega$  абсолютно черного тела.

Соотношение (1.45) выражает **закон Стефана–Больцмана**: плотность энергии, испускаемой абсолютно черным телом, пропорциональна четвертой степени абсолютной температуры  $T$ . Постоянная  $\sigma_c$  закона Стефана–Больцмана равна:

$$\sigma_c = 7,64 \cdot 10^{-16} \text{ Дж}/(\text{К}^4 \cdot \text{м}^3). \quad (1.46)$$

Первоначально закон был сформулирован на основании опытных данных, а впоследствии значение постоянной  $\sigma_c$  было теоретически рассчитано на основе закона излучения Планка.

2. В задаче для простоты расчетов по умолчанию предполагалось, что все фотоны имеют одну и ту же частоту. В действительности фотонный газ представляет собой совокупность фотонов различных частот, но это не изменяет полученных выше уравнений состояния. Следует лишь под плотностью энергии  $\varpi$  понимать полную плотность энергии по всем частотам:

$$\varpi = \int_0^{\infty} \varpi_{\omega} d\omega,$$

где  $\varpi_{\omega}$  — спектральная плотность энергии излучения абсолютно черного тела, которая описывается **формулой Планка** (рис. 1.7)

$$\varpi_{\omega} = \frac{\hbar \omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp[\hbar \omega / (k_B T)] - 1}.$$

Частота  $\omega_m$ , соответствующая максимуму спектральной плотности энергии, увеличивается с ростом температуры:  $\omega_m \approx 6,5 \cdot 10^{11} \cdot T$  [радиан/с] (**закон смещения Вина**).

**Ответ.**  $P = \varpi / 3$ .

**Задача 1.10.** Лазер, мощность которого равна  $W = 700$  МВт, а площадь поперечного сечения светового пучка  $\Sigma = 1 \text{ см}^2$ , освещает поверхность, расположенную перпендикулярно направлению распространения света. Рассчитать давление света на поверхность при полном поглощении.

**Решение.** По формуле (1.34) при  $R = 0$  имеем

$$P = \frac{I}{c} = \frac{W / \Sigma}{c} = \frac{700 \cdot 10^6 / 10^{-4}}{3 \cdot 10^8} = 2,3 \cdot 10^4 \text{ Па} \approx 0,2 \text{ атм}. \quad (1.47)$$

**Ответ.**  $P = \frac{W}{c \cdot \Sigma} = 2,3 \cdot 10^4 \text{ Па}.$

**Замечания**

1. Сравним давление лазерного излучения с избыточным давлением в акустической волне. На пороге слышимости звука амплитуда давления в акустической волне на частоте 1 000 Гц равна  $P_0 = 2 \cdot 10^{-5} \text{ Па}$ , а давлению (1.47) соответствует громкость  $20 \lg(P/P_0) = 140 \text{ дБ}$  (шум выстрела пистолета).

2. При фокусировке света и уменьшении поперечного сечения пучка света до  $\Sigma_1 \approx \lambda^2$  давление возрастает в  $\Sigma/\Sigma_1$  раз. Например, при  $\lambda = 7 \cdot 10^{-7} \text{ м}$  и  $\Sigma_1 \approx \lambda^2 = 5 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2$  давление достигает значения  $P \approx 3 \cdot 10^{10} \text{ Па}$  (в  $3 \cdot 10^5$  раз больше атмосферного давления).

**§1.6. Фотоны и электроны. Эффект Комптона.  
Рассеяние Томсона**

**Задача 1.11. (Свободный электрон, классический случай.)**

Плоская световая волна рассеивается на свободном электроне. Показать, что в классическом (нерелятивистском) случае частота рассеянной волны равна частоте падающей.

**Решение**

1. Пусть электрон в момент времени  $t = 0$  находится в начале системы координат. Запишем уравнение движения электрона в электрическом поле падающей волны с напряженностью  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \sin(\omega t - kz)$ :

$$m\ddot{\mathbf{r}} = e\mathbf{E}_0 \sin \omega t. \quad (1.48)$$

Интегрируя уравнение (2.48) по времени, получаем закон движения электрона

$$\mathbf{r}(t) = \frac{e\mathbf{E}_0 \sin(\omega t)}{m\omega^2} + \mathbf{v}_0 t. \quad (1.49)$$

При решении уравнения движения электрона предполагалось, что амплитуда колебаний электрона  $e\mathcal{E}_0/(m\omega^2)$  много меньше длины падающей световой волны.

2. Колебательное движение электрона (1.49) сопровождается излучением. Напряженность переизлученной волны (в рамках теории классического дипольного излучения) задается формулой

$$\delta \mathbf{E}(\mathbf{r}_1, t) = \frac{\mu_0 e}{4\pi r_1^3} \left[ \left[ \ddot{\mathbf{r}}(t) \times \mathbf{r}_1 \right] \times \mathbf{r}_1 \right], \quad (1.50)$$

где  $\mathbf{r}_1$  – радиус-вектор, проведенный из точки  $\mathbf{r}(t)$ , где находится электрон, в точку наблюдения, а  $\mathbf{r}(t)$  определяется законом движения электрона (1.49). Данная схема решения (с разделением на этапы 1 и 2) справедлива при  $|\delta \mathbf{E}| \ll \mathcal{E}_0$ .

Из формул (1.49) и (1.50) следует, что падающая электромагнитная волна переизлучается во всех направлениях (кроме случая  $\ddot{\mathbf{r}} \parallel \mathbf{r}_1$ , когда  $\delta \mathbf{E} = 0$ ). Частота вторичного излучения совпадает с частотой падающей волны, а полная мощность рассеянного излучения  $I_{\text{рас}}$  равна

$$I_{\text{рас}} = \frac{e^4}{6\pi \epsilon_0^2 m^2 c^4} I, \quad (1.51)$$

где  $I = c \epsilon_0 \mathbf{E}_0^2 / 2$  — интенсивность падающего света. Коэффициент  $\frac{e^4}{6\pi \epsilon_0^2 m^2 c^4} = 6,65 \cdot 10^{-29} \text{ м}^2$  в формуле (1.51) называется сечением рассеяния, а само рассеяние называется **томсоновским рассеянием**.

**Задача 1.12. (Невозможность процессов рождения фотонов на свободных электронах.)** Показать, что свободный электрон не может излучать отдельный квант света.

**Решение.** Формально не существует «закона сохранения числа фотонов», но процесс с рождением одного фотона при изменении состояния свободного электрона противоречит законам сохранения энергии и импульса. Для доказательства этого утверждения перейдем в систему отсчета, в которой свободный электрон покоится в исходном состоянии. Пусть затем электрон испускает фотон с энергией  $E_\phi$  и импульсом  $\mathbf{p}_\phi$ .

Взаимодействие частиц (в том числе фотонов и электронов) описывается как упругое взаимодействие, для которого можно записать следующую систему уравнений.

$$\text{Закон сохранения импульса} \quad 0 = \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_\phi . \quad (1.52)$$

$$\text{Закон сохранения энергии} \quad mc^2 = E_e + E_\phi . \quad (1.53)$$

$$\text{Закон дисперсии электрона} \quad E_e = \sqrt{m^2 c^4 + p_e^2 c^2} . \quad (1.54)$$

$$\text{Закон дисперсии фотона} \quad E_\phi = p_\phi c . \quad (1.55)$$

Решая систему уравнений (1.52)–(1.55), получаем из (1.53)

$$E_\phi = mc^2 - E_e ,$$

учитывая (1.54), имеем

$$E_\phi = mc^2 - \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4} ,$$

используя (1.52) и (1.55), получим

$$E_\phi = mc^2 - \sqrt{E_\phi^2 + m^2 c^4} .$$

Решая последнее уравнение относительно энергии фотона, находим  $2E_\phi mc^2 = 0$  и  $E_\phi = 0$ , что и требовалось доказать.

**Задача 1.13 (Эффект Комптона.)** Эффект Комптона — упругое рассеяние электромагнитного излучения на свободных электронах, сопровождающееся увеличением длины волны. Фотон с длиной волны  $\lambda$  рассеивается на неподвижном электроне и отклоняется от первоначального направления движения на угол  $\theta$  (рис. 1.8). На сколько изменится длина волны падающего излучения после взаимодействия?

**Решение.** Схема рассеяния фотона на электроне изображена на рис. 1.8. Параметры электрона до взаимодействия отмечены индексом 0, после взаимодействия — индексом 1.

Считая взаимодействие фотона и электрона абсолютно упругое, для системы (электрон + фотон) записываем законы сохранения энергии и импульса:

*закон сохранения энергии*

$$E_\phi + E_{e0} = E_{\phi 1} + E_{e1} , \quad (1.56)$$

закон сохранения импульса

$$\mathbf{p}_\Phi = \mathbf{p}_{\Phi 1} + \mathbf{p}_{e1} . \quad (1.57)$$

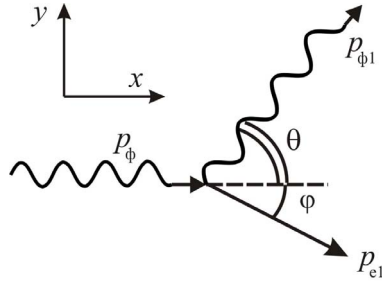


Рис. 1.8. Схема рассеяния фотона на неподвижном электроне. Фотоны в процессах взаимодействия графически изображаются волнистыми линиями, электроны — сплошными линиями (как на фейнмановских диаграммах).

С учетом закона дисперсии электрона, для энергии электрона до и после взаимодействия имеем:

$$E_{e0} = mc^2 = 511 \text{ кэВ} \approx 0,5 \text{ МэВ} , \quad (1.58)$$

$$E_{e1} = \sqrt{p_{e1}^2 c^2 + m^2 c^4} ; \quad (1.59)$$

а из закона дисперсии для фотона следует

$$E_\Phi = cp_\Phi , \quad (1.60)$$

$$E_{\Phi 1} = cp_{\Phi 1} . \quad (1.61)$$

В законе сохранения импульса (векторное уравнение (1.57) перенесем импульс рассеянного кванта в левую часть и возведем в квадрат обе части равенства:

$$(\mathbf{p}_\Phi - \mathbf{p}_{\Phi 1})^2 = \mathbf{p}_e^2 .$$

В результате получаем

$$\mathbf{p}_\Phi^2 - \mathbf{p}_\Phi \mathbf{p}_{\Phi 1} + \mathbf{p}_{\Phi 1}^2 = \mathbf{p}_e^2 ,$$

или, в скалярном виде,

$$p_\Phi^2 - 2p_\Phi p_{\Phi 1} \cos \theta + p_{\Phi 1}^2 = p_{e1}^2 . \quad (1.62)$$

Возводя в квадрат обе части равенства  $E_\Phi + E_{e0} - E_{\Phi 1} = E_{e1}$  (закон сохранения (1.56)) и используя законы дисперсии (1.58)–(1.61), находим:



$$p_{e1}^2 = (p_\Phi - p_{\Phi 1})^2 + 2mc(p_\Phi - p_{\Phi 1}).$$

Подставляя полученное выражение для импульса электрона в (1.62), имеем

$$p_\Phi^2 - 2p_\Phi p_{\Phi 1} \cos \theta + p_{\Phi 1}^2 = (p_\Phi - p_{\Phi 1})^2 + 2mc(p_\Phi - p_{\Phi 1}).$$

Считая заданным первоначальный импульс фотона  $p_\Phi = \hbar(2\pi/\lambda)$ , решаем полученное уравнение относительно  $p_{\Phi 1}$  и находим

$$1 - \cos \theta = mc \left( \frac{1}{p_{\Phi 1}} - \frac{1}{p_\Phi} \right). \quad (1.63)$$

Из (1.63) для разности длин волн имеем

$$\lambda_1 - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos \theta) = \lambda_K(1 - \cos \theta), \quad (1.64)$$

где  $\lambda_K = \frac{2\pi\hbar}{mc} = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ м}$  – **комптоновская длина волны** электрона.

Так как  $\cos \theta \leq 1$ , то комптоновское рассеяние фотона на неподвижном электроне идет с увеличением длины волны фотона.

**Ответ.**  $\lambda_1 = \lambda + \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos \theta).$

**Замечание.** Комптоновская длина волны электрона  $\lambda_K$  столь мала, что изменение длины волны в эффекте Комптона заметно только для гамма-диапазона ( $\hbar\omega > 100 \text{ кэВ}$ ) электромагнитного спектра.

**Задача 1.14 (Определение угла рассеяния электрона.)** Фотон с энергией  $E_\Phi = 400 \text{ кэВ}$  рассеялся под углом  $\theta = \pi/4$  на неподвижном свободном электроне. Определить угол  $\varphi$  между направлением скорости, которую получил электрон в результате взаимодействия, и направлением первоначальной скорости фотона (см. рис. 1.8).

**Решение.** Запишем закон сохранения импульса (1.61) в проекциях на координатные оси (см. рис. 1.8):

$$p_{\Phi} = p_{\Phi 1} \cos \theta + p_{e1} \cos \varphi, \quad (1.65)$$

$$0 = p_{\Phi 1} \sin \theta - p_{e1} \sin \varphi. \quad (1.66)$$

Из системы уравнений (1.65) и (1.66) находим

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sin \theta}{p_{\Phi} / p_{\Phi 1} - \cos \theta}. \quad (1.67)$$

Используя результат (1.63) предыдущей задачи, а именно —  $p_{\Phi} / p_{\Phi 1} = 1 + p_{\Phi} (1 - \cos \theta) / (mc)$ , окончательно получаем

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sin \theta}{(1 - \cos \theta)(1 + p_{\Phi} / (mc))} = \frac{\sin \theta}{(1 - \cos \theta)(1 + E_{\Phi} / (mc^2))}.$$

Поскольку  $\frac{E_{\Phi}}{mc^2} = \frac{4 \cdot 10^5 \text{ эВ}}{5 \cdot 10^5 \text{ эВ}} = 0,8$ , то для численной оценки имеем

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\sin \theta}{(1 - \cos \theta)(1 + E_{\Phi} / (mc^2))} = \frac{1 / \sqrt{2}}{(1 - 1 / \sqrt{2})(1 + 0,8)} = 1,36$$

и  $\varphi = 0,94 \text{ рад} = 54^\circ$ .

$$\textbf{Ответ.} \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{\sin \theta}{(1 - \cos \theta)(1 + E_{\Phi} / (mc^2))}, \quad \varphi = 0,94 \text{ рад} = 54^\circ.$$

**Задача 1.15 (Изменение частоты фотона.)** Фотон с частотой  $\nu = 6 \cdot 10^{19} \text{ Гц}$  взаимодействует с покоящимся свободным электроном. Определить частоту  $\nu'$  фотона, рассеянного назад.

**Решение.** Так как  $\theta = 180^\circ$ ,  $\lambda = c / \nu$ ,  $\lambda' = c / \nu'$ , то формула  $\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mc}(1 - \cos \theta)$  (1.64) для эффекта Комптона принимает вид

$$\nu' = \frac{\nu}{1 + 4\pi\hbar\nu / (mc^2)}. \quad (1.68)$$

На основании данных задачи

$$4\pi\hbar\nu / (mc^2) = 4\pi \cdot 10^{-34} \cdot 6 \cdot 10^{19} / (0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 9 \cdot 10^{16}) \approx 0,93.$$

Таким образом, частота уменьшается приблизительно в два раза:

$$\nu' = \frac{\nu}{1 + 4\pi\hbar\nu / (mc^2)} \approx \frac{6 \cdot 10^{19}}{1 + 0,93} \text{ Гц} \approx 3 \cdot 10^{19} \text{ Гц}.$$

**Ответ.**  $\nu' = \frac{\nu}{1 + 4\pi\hbar\nu / (mc^2)} \approx 3 \cdot 10^{19} \text{ Гц}.$

### Приложение 1.1. Интенсивность и вероятность. Флуктуации интенсивности в световом пучке

Среднее число фотонов в пучке света, пересекающих поперечное сечение площадью  $\Sigma$  за время  $\Delta t$ , равно

$$\langle N_{\Phi} \rangle = (c \Delta t \cdot \Sigma) \cdot n_{\Phi}.$$

Точное число фотонов  $N_{\Phi}$  в объеме  $V = (c \Delta t \cdot \Sigma)$  отличается от среднего, а величина  $\delta N_{\Phi} = N_{\Phi} - \langle N_{\Phi} \rangle$  называется **флуктуацией**.

Флуктуация  $\delta N_{\Phi}$  вычисляется так же, как и флуктуация числа молекул газа в объеме  $V$ . Вероятность обнаружения заданного числа частиц в объеме  $V$  описывается биномиальным законом распределения. При этом среднее значение числа фотонов в объеме  $V$  равно  $\langle N_{\Phi} \rangle = N_{\Phi} \cdot \kappa$ , где  $\kappa$  – вероятность нахождения фотона в рассматриваемом объеме. Среднеквадратичное отклонение от среднего значения равно  $\sigma_N = \sqrt{N_{\Phi} \kappa (1 - \kappa)}$ .

Относительная флуктуация числа частиц

$$\frac{\sigma_N}{\langle N_{\Phi} \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N_{\Phi}}}$$

уменьшается с ростом числа частиц. В классическом пределе ( $N_{\Phi} \gg 1$ ) флуктуациями можно пренебречь. В случае же, когда концентрация фотонов порядка единицы ( $N_{\Phi} \gtrsim 1$ ), квантовые флуктуации становятся существенными.

С. И. Вавиловым наблюдались флуктуации интенсивности света в видимом диапазоне. Флуктуации интенсивности регистрировались человеческим глазом, обладающим порогом чувствительности: при интенсивности света ниже порога чувствительности

глаз не регистрирует вспышки света. В опыте С. И. Вавилова источник света создавал периодическую последовательность вспышек. При достаточной интенсивности (выше порога чувствительности) глаз регистрировал все вспышки. При интенсивности вблизи порога чувствительности благодаря флуктуациям интенсивности часть вспышек содержала число фотонов ниже порога чувствительности и не регистрировалась глазом. Вспышки, число фотонов в которых было выше порога чувствительности, регистрировались не периодически, случайным образом, что явилось доказательством статистических флуктуаций числа фотонов в отдельных вспышках света.

### Приложение 1.2. Электромагнитные волны в плазме

Газовая плазма – частично или полностью ионизованный газ, в котором плотности положительных и отрицательных зарядов практически одинаковы. Газовая плазма обладает высокими концентрациями свободных электронов и ионов, но в среднем электрически нейтральна.

В плазме существует много различных типов электромагнитных волн в зависимости от состояния плазмы, ее конфигурации, наличия внешних электрических и магнитных полей. В отсутствие полей в холодной изотропной плазме существуют две моды собственных колебаний: продольные и поперечные волны. Для поперечных волн закон дисперсии имеет вид

$$\omega_t(\mathbf{k}) = \sqrt{\omega_p^2 + k^2 c^2}, \quad (1.69)$$

где  $\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 m}}$  – плазменная частота,  $n_e$  – средняя концентрация

электронов,  $m$  – их масса,  $e$  – заряд,  $\mathbf{k}$  – волновой вектор волны.

Аналогично описанию волн в вакууме, как потока фотонов, каждой поперечной плазменной волне с частотой  $\omega_t(\mathbf{k})$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$  ставятся в соответствие частицы с энергией  $\hbar\omega_t(\mathbf{k})$  и импульсом  $\hbar\mathbf{k}$ , называемые **поперечными плазмонами**.

Концентрация плазмонов связана с интенсивностью плазменной волны и вычисляется, как и для фотонов, по формуле (1.13):

$$n_\Phi = \frac{\epsilon(\omega_t)\epsilon_0 E_0^2}{2\hbar\omega_t},$$

где  $\varepsilon(\omega_t)$  – значение диэлектрической проницаемости плазмы на частоте поперечной плазменной волны, а  $E_0$  – амплитуда плазменной волны.

Через концентрацию  $n_\phi$  выражается плотность энергии  $\hbar\omega_t(k)n_\phi$  и плотность импульса  $\hbar\mathbf{k}n_\phi$  плазменных волн.

Благодаря введению частиц, подобных поперечным плазмонам, излучение, поглощение и взаимодействие электромагнитных волн в плазме описывается как рождение, поглощение и упругое взаимодействие частиц.

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D1.1.** Изотропный источник испускает свет с длиной волны  $\lambda = 470$  нм. Световая мощность источника  $W = 10$  Вт. Считая источник точечным, найти:

а) среднее число фотонов, испускаемых источником света в единицу времени;

б) среднюю концентрацию фотонов на расстоянии  $r = 1,5$  м от источника.

**Ответ.** а)  $\frac{dN}{dt} = \frac{W\lambda}{2\pi\hbar c} = 2,36 \cdot 10^{19} \text{ с}^{-1}$ , б)  $n = \frac{W\lambda}{8\pi^2 c^2 \hbar r^2} = 2,79 \cdot 10^9 \text{ м}^{-3}$ .

**Задача D1.2.** Лазерный импульс длительностью  $\tau = 0,2$  мс сфокусирован в пятно диаметром  $d = 10$  мкм на поверхность, перпендикулярную к направлению распространения света. Коэффициент отражения поверхности  $R = 0,5$ , а энергия лазерного импульса  $E = 7$  Дж. Найти среднее давление светового импульса на поверхность.

**Ответ.**  $P = \frac{4E(1+R)}{c\tau\pi d^2} \approx 3,2 \cdot 10^9 \text{ Па}$ .

**Задача 1.3.** Световая волна с интенсивностью  $I = 0,4$  Вт/см<sup>2</sup> падает под углом  $\theta = 45^\circ$  на плоскую зеркальную поверхность с коэффициентом отражения  $R = 0,9$ . Рассчитать с помощью кор-

пускулярных представлений значение нормального давления, оказываемого светом на эту поверхность.

$$\text{Ответ. } P = \frac{I(1+R)\cos^2\theta}{c} = 1,3 \cdot 10^{-5} \text{ Па.}$$

**Задача D1.4.** Исходное напряжение на рентгеновской трубке равно  $V_0 = 18$  кВ. При увеличении напряжения на  $\Delta V$  длина волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра изменилась на  $\Delta\lambda = 21$  пм. Найти изменение напряжения  $\Delta V$  на рентгеновской трубке.

$$\text{Ответ. } \Delta V = V_0 \left[ 1 - \frac{e\Delta\lambda V_0}{2\pi c\hbar} \right]^{-1} \approx 26 \text{ кВ.}$$

**Задача D1.5.** Поверхность металла поочередно освещалась светом с длинами волн  $\lambda_1 = 0,40$  мкм и  $\lambda_2 = 0,60$  мкм. В обоих случаях наблюдались фотоэлектроны, максимальные скорости которых отличались друг от друга в  $n = 3,0$  раза. Найти работу выхода электронов из этого металла.

$$\text{Ответ. } \Delta A_{\text{вых}} = \frac{2\pi c\hbar(n^2 - \lambda_2/\lambda_1)}{e\lambda_2(n^2 - 1)} = 1,93 \text{ эВ.}$$

**Задача D1.6.** После рассеяния на свободном покоившемся электроне длина волны фотона составила  $\alpha = 125\%$  от первоначального значения. Энергия электрона после взаимодействия  $E_{e1} = 0,7$  МэВ. Найти энергию фотона до рассеяния.

$$\text{Ответ. } E_{\phi} = \frac{\alpha(E_{e1} - mc^2)}{\alpha - 100} = 1,0 \text{ МэВ.}$$

**Задача D1.7.** Фотон с энергией  $E_{\phi} = 1$  МэВ рассеялся под углом  $\theta = 60^\circ$  на покоившемся свободном электроне. Найти энергию  $E_{e1}$  электрона после рассеяния.

$$\text{Ответ. } E_{e1} = \frac{E_{\phi}^2(1 - \cos\theta) + m^2c^4}{E_{\phi}(1 - \cos\theta) + mc^2} = 0,75 \text{ МэВ.}$$

## Глава 2

## ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ЧАСТИЦ. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ

## §3.1. Уравнения де Бройля. Длина волны де Бройля

Итак, свет можно рассматривать, с одной стороны, как электромагнитные волны, а с другой стороны — как поток фотонов. В одних условиях свет проявляет волновые свойства (интерференция, дифракция), в других — корпускулярные свойства (фотоэффект, эффект Комптона).

В 1924 г. Л. де Бройль высказал **гипотезу**, согласно которой корпускулярно-волновой дуализм присущ всем без исключения материальным частицам: **всякой движущейся частице можно сопоставить бегущую волну**. Использование аналогий между механикой и оптикой позволило де Бройлю теоретически описать волновые свойства частиц. Идея де Бройля изменила физическую картину мира.

В соответствии гипотезой де Бройля каждая частица обладает как корпускулярными, так и волновыми свойствами, которые она проявляет на объектах, размеры которых сравнимы с длиной волны частицы.

Уравнения де Бройля

$$\begin{cases} E = \hbar\omega, \\ \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \end{cases} \quad (2.1)$$

где  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  Дж·с — постоянная Планка, связывают энергию  $E$  и импульс  $\mathbf{p}$ , описывающие состояние частицы, с характеристиками **волны де Бройля** этой частицы: частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\mathbf{k}$ .

Для свободно движущейся частицы с импульсом, направленным вдоль оси  $OX$ , волна де Бройля (волновая функция) является плоской гармонической волной:

$$\Psi(x, t) = C \exp[i(\omega t - kx)]. \quad (2.2)$$

Закон дисперсии  $E = E(p)$  для свободной частицы с массой  $m$ , волновая функция которой описывается уравнением (2.2):

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.3)$$

Важное отличие корпускулярно-волнового дуализма частиц от корпускулярно-волнового дуализма света заключается в интерпретации интенсивности волны, пропорциональной квадрату амплитуды.

Если квадрат амплитуды световой волны определяет концентрацию фотонов, то физический смысл квадрата модуля волновой функции

$$|\Psi(r, t)|^2 = \Psi(r, t)\Psi^*(r, t) \quad (2.4)$$

есть плотность вероятности обнаружения частицы в момент времени  $t$  в окрестности точки с координатой  $\mathbf{r}$  при условии нормировки:

$$\int_{sp} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = 1, \quad (2.5)$$

где интегрирование производится по всему пространству ( $space$ ).

Статистическая интерпретация волновой функции была дана М. Борном в 1926 г.

**Задача 2.1.** Вычислите длины волн де Бройля для электрона  $\lambda_e$ , движущегося со скоростью 10 000 км/с, и автомобиля  $\lambda_a$  массой 2 т, движущегося со скоростью 144 км/ч.

**Решение.** Согласно уравнению де Бройля (2.1)  $p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ :

$$\lambda_e = \frac{2\pi\hbar}{m_e v_e} = \frac{2\pi \cdot 10^{-34}}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 10^7} = 7,3 \cdot 10^{-12} \text{ м},$$

$$\lambda_a = \frac{2\pi\hbar}{m_a v_a} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{2000 \cdot 144 \cdot 10/36} = 8,3 \cdot 10^{-39} \text{ м}.$$

Таким образом:  $\lambda_e/\lambda_a \approx 10^{27}$ .

**Ответ.**  $\lambda_e = 7,3 \cdot 10^{-12} \text{ м}$ ,  $\lambda_a = 8,3 \cdot 10^{-39} \text{ м}$ .

#### **Вопросы для самопроверки**

1) Во сколько раз изменится длина волны де Бройля электрона, если увеличить его скорость в 3 раза?



2) Во сколько раз длина волны де Бройля протона отличается от длины волны де Бройля электрона, если они движутся с одинаковыми скоростями?

3) Для каких частиц будет существенным проявление корпускулярно-волнового дуализма в структуре кристаллической решетки с периодом  $a = 0,3$  нм?

**Ответ.:** 1) Уменьшится в 3 раза. 2) Меньше в  $\sim 1\,900$  раз. 3) Для частиц, длина волны де-Бройля которых сопоставима с периодом кристаллической решетки (например, для электронов в металле).

**Задача 2.2.** Вычислите длины волн де Бройля для фотона и свободных частиц: электрона, протона и атома урана, имеющих кинетическую энергию 156 эВ.

**Решение.** Длина волны де Бройля частицы определяется ее импульсом  $\lambda = 2\pi/k = 2\pi\hbar/p$  (2.1), а импульс частицы связан с ее энергией законом дисперсии: для фотона  $E = cp$ , а для свободных

частиц  $E = \frac{p^2}{2m}$  (2.3). Поэтому для фотона получаем  $\lambda_f = c \left( \frac{2\pi\hbar}{E} \right)$

и для свободных частиц  $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}$ . Длина волны фотона с кинетической энергией

$$E = 156\text{эВ} = 156 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 2,5 \cdot 10^{-17} \text{ Дж} :$$

$$\lambda_f = \frac{2\pi c \hbar}{E} = \frac{2\pi \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-34}}{2,5 \cdot 10^{-17}} \approx 7,7 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 7,7 \text{ нм} .$$

Учитывая значения масс электрона  $m_e = 0,9 \cdot 10^{-30}$  кг, протона  $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг, атома урана  $m_v = \frac{238,0 \cdot 10^{-3}}{6 \cdot 10^{23}} \approx 4 \cdot 10^{-25}$  кг, находим соответствующие им длины волн

$$\lambda_e = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e E}} = \frac{2\pi \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-31} \cdot 2,5 \cdot 10^{-17}}} \approx 1,0 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,10 \text{ нм} ,$$

$$\lambda_p = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_p E}} = \frac{2\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 2,5 \cdot 10^{-17}}} \approx 2,2 \cdot 10^{-12} \text{ м} = 2,2 \cdot 10^{-3} \text{ нм} ,$$

$$\lambda_U = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_U E}} = \frac{2\pi \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 4 \cdot 10^{-25} \cdot 2,5 \cdot 10^{-17}}} \approx 1,4 \cdot 10^{-13} \text{ м} = 1,4 \cdot 10^{-4} \text{ нм}.$$

**Ответ.**  $\lambda_f = \frac{2\pi c\hbar}{E} \approx 7,7 \text{ нм}, \quad \lambda_e = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e E}} \approx 0,10 \text{ нм},$

$$\lambda_p = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_p E}} \approx 2,2 \cdot 10^{-3} \text{ нм}, \quad \lambda_U = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_U E}} \approx 1,4 \cdot 10^{-4} \text{ нм}.$$

**Вопрос для самопроверки.** Изменится ли длина волны частицы, если она попадет в потенциальное поле?

**Ответ.** Длина волны частицы изменится, так как по закону сохранения механической энергии часть кинетической энергии частицы переходит в потенциальную, что приводит к изменению импульса частицы и соответственно длины волны.

**Задача 2.3.** Напряжение, разгоняющее электрон в кинескопе, равно  $U = 20\,000 \text{ В}$ , а диаметр электронного пучка  $d = 0,1 \text{ мм}$ .

1) Почему электрон, проявляя волновые свойства в кристаллической структуре металла, не проявляет волновых свойств в кинескопе телевизора?

2) Объясните, почему электронный микроскоп обладает большей разрешающей способностью, чем обычный. Разрешающая способность обычного микроскопа ограничена длиной волны используемого для освещения света.

**Решение.** Пусть импульс электрона до попадания в электростатическое поле в момент времени  $t_1$  начала движения равен нулю. Тогда его механическая энергия в момент времени  $t_1$  также равна нулю. Сразу перед попаданием на экран (момент времени  $t_2$ )

электрон имеет кинетическую  $\frac{p_e^2}{2m}$  и потенциальную энергию

$(-eU)$ , где  $e$  – модуль заряда электрона. По закону сохранения механической энергии для моментов времени  $t_1$  и  $t_2$  имеем

$$0 = \frac{p_e^2}{2m} - eU, \text{ или } \frac{p_e^2}{2m} = eU.$$

Выражая из (2.1) импульс  $p_e = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_e}$ , получаем:  $\frac{4\pi^2\hbar^2}{\lambda_e^2 2m} = eU$ .

Отсюда следует

$$\lambda_e = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} = \frac{2\pi \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 2 \cdot 10^4}} \approx 0,8 \cdot 10^{-11} \text{ м} = 0,08 \text{ \AA}.$$

Для электрона в меди с энергией Ферми (см. ниже гл. 6, 9) ( $E_F = 7 \text{ эВ} = 1,1 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}$ ) длина волны порядка межатомного расстояния  $a$ :

$$\lambda_e = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_F}} = \frac{2\pi \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 1,1 \cdot 10^{-18}}} \approx 4 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 4 \text{ \AA} \sim a,$$

и волновые свойства электронов в меди (дифракция, интерференция и др.) проявляются в кристаллической структуре, обладающей периодичностью  $a$  порядка нескольких ангстрем.

Длина волны электрона, движущегося в трубке кинескопа, значительно меньше характерных размеров пучка:  $\lambda_e = 0,08 \text{ \AA} \ll d = 0,1 \text{ мм}$ . Поэтому его волновые свойства при движении в кинескопе не проявляются.

Так как средняя длина волны видимого света  $\lambda_{\text{ср}}$  значительно больше длины волны электрона  $\lambda_e$ , движущегося в кинескопе:

$$\lambda_{\text{ср}} \approx 5000 \text{ \AA} \gg \lambda_e = 0,08 \text{ \AA},$$

то в электронный микроскоп можно рассмотреть объекты, размер которых в  $\lambda_{\text{ср}}/\lambda_e \sim 10^5$  раз меньше, чем разрешение обычного оптического микроскопа.

**Ответ.** 1) Электрон не проявляет волновых свойств в кинескопе телевизора, потому что  $\lambda_e \ll d$ . 2) Электронный микроскоп обладает большей разрешающей способностью, так как длина волны электрона в  $\lambda_{\text{ср}}/\lambda_e \sim 10^5$  раз меньше средней длины волны видимого света.

**Задача 2.4.** Частица движется в положительном направлении оси  $OX$  в одномерном потенциальном поле (см. рис. 2.1) Высота потенциального барьера  $U$ , кинетическая энергия частицы в облас-

ти I  $E_K^I > U$ . Во сколько раз изменяется длина волны частицы при переходе из области I в область II?

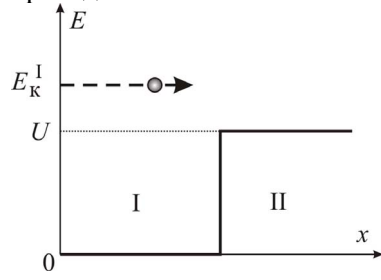


Рис. 2.1. Область I – частица в потенциальной яме, область II – частица над барьером.

**Решение.** Обозначим через  $\lambda_0$  и  $\lambda$  длину волны частицы в областях I и II соответственно.

При переходе частицы в область II часть ее кинетической энергии  $E_K^I$  переходит в потенциальную  $U$ . Из закона сохранения механической энергии  $E_K^I = E_K^{II} + U$  находим кинетическую энергию частицы  $E_K^{II}$  в области II:

$$E_K^{II} = E_K^I - U.$$

$$\text{Используя квадратичный закон дисперсии } E_K = \frac{p^2}{2m} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m\lambda^2},$$

получаем:

$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_K^I}}, \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(E_K^I - U)}} \quad \text{и} \quad \frac{\lambda}{\lambda_0} = \sqrt{\frac{E_K^I}{E_K^I - U}}.$$

$$\text{Ответ. } \frac{\lambda}{\lambda_0} = \sqrt{\frac{E_K^I}{E_K^I - U}}, \text{ то есть длина волны увеличивается.}$$

## §2.2. Соотношения неопределенностей Гейзенберга

Свободная частица, имеющая точные значения импульса  $\mathbf{p}$  и энергии  $E = p^2/(2m)$ , с одинаковой плотностью вероятности, равной

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi(\mathbf{r}, t)\Psi^*(\mathbf{r}, t) = C^2 = \text{const},$$

может быть обнаружена в любой точке пространства, т. е. де бройлевская частица не локализована в координатном пространстве. Это означает, что при заданном значении импульса  $\mathbf{p} = p\mathbf{e}_x$  неопределенность значения импульса  $\Delta p_x = 0$ , а неопределенность значения координаты  $x$   $\Delta x \rightarrow \infty$ .

Описание локализованной частицы основано на введении неопределенности импульса  $\Delta p_x \neq 0$  (и неопределенности волнового вектора в соответствии  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ ).

Какими волнами можно описать локализованную в определенной области пространства  $\Delta x$  частицу (в фиксированный момент времени)?

Локализация в области  $x_0 - \Delta x/2 < x < x_0 + \Delta x/2$  означает, что плотность вероятности  $|\Psi(x)|^2$  нахождения частицы в этой области (а значит и  $|\Psi(x)|$ ) существенно больше, чем в остальной области пространства. Такой эффект возрастания амплитуды в ограниченной области  $\Delta x$  наблюдается при суперпозиции плоских волн с одинаковыми амплитудами  $A/\Delta\omega$  и близкими частотами  $\omega_0 - \Delta\omega/2 < \omega < \omega_0 + \Delta\omega/2$  (при движении волнового пакета).

Действительно, напряженность электрического поля  $\mathcal{E}(x, t)$ , создаваемая группой волн – суперпозиция напряженностей, создаваемых каждой волной в отдельности:  $\mathcal{E}(x, t) = \sum \mathcal{E}_i$ . Чтобы перейти от суммирования к интегрированию под частотой монохроматической волны  $\omega$  будем понимать бесконечно узкий интервал частот  $d\omega$  вблизи  $\omega$ . Тогда амплитуда такой волны равна  $\mathcal{E}_{0i}(\omega) = Ad\omega/\Delta\omega$ , суммарная напряженность группы волн:

$$\mathcal{E}(x, t) = \int_{\omega_0 - \Delta\omega/2}^{\omega_0 + \Delta\omega/2} \frac{A}{\Delta\omega} \cos(\omega t - kx) d\omega. \quad (2.6)$$

Рассмотрим случай, когда среда описывается нелинейным законом дисперсии ( $k \neq \omega/c$ , где фазовая скорость  $c = \text{const}$ ).

Поскольку интервал частот узкий, то можно разложить волновое число в ряд Тейлора вблизи среднего значения  $k_0$ :

$$k = k_0 + \left. \frac{dk}{d\omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) = k_0 + \frac{\omega - \omega_0}{u}, \quad (2.7)$$

где

$$u = \left( \frac{d\omega}{dk} \right) \Big|_{\omega_0} \quad (2.8)$$

является **групповой скоростью** (скоростью движения максимума функции  $\mathcal{E}_0$  (см. рис. 2.2)). Тогда аргумент косинуса в (2.6) можно представить в виде новой переменной

$$\zeta = \omega t - kx = \omega(t - x/u) + x(\omega_0/u - k_0). \quad (2.9)$$

Интегрируя (2.6) в пределах от  $\zeta_1 = (\omega_0 - \Delta\omega/2)(t - x/u) + x(\omega_0/u - k_0)$  до  $\zeta_2 = (\omega_0 + \Delta\omega/2)(t - x/u) + x(\omega_0/u - k_0)$ , получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(x, t) &= \int_{\zeta_1}^{\zeta_2} \frac{A}{\Delta\omega(t - x/u)} \cos \zeta d\zeta = \\ &= A \underbrace{\frac{\sin[\Delta\omega(t - x/u)/2]}{\Delta\omega(t - x/u)/2}}_{\text{амплитуда}} \cos(\omega_0 t - k_0 x). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Здесь **амплитуда волнового пакета**  $\mathcal{E}_0(x, t)$  равна

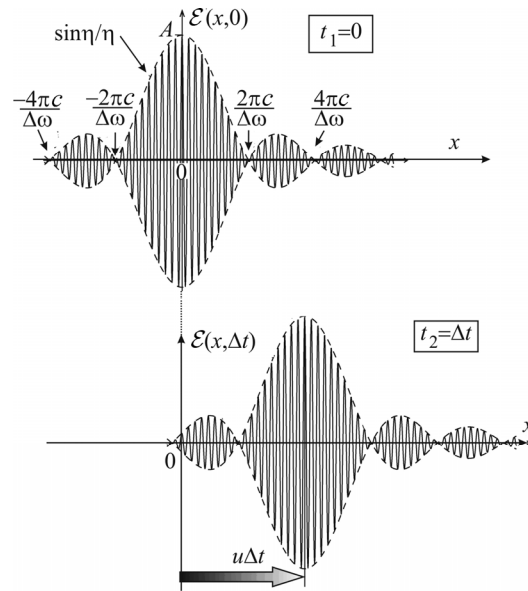
$$\mathcal{E}_0(x, t) = A \frac{\sin[\Delta\omega(t - x/u)/2]}{\Delta\omega(t - x/u)/2} = A \frac{\sin \eta}{\eta}, \quad (2.11)$$

$$\eta = \Delta\omega(t - x/u)/2. \quad (2.12)$$

На рис. 2.2 представлена зависимость  $\mathcal{E}(x, t)$  (2.10) от пространственной координаты  $x$  для двух последовательных моментов времени  $t_1 = 0$  и  $t_2 = \Delta t$ .

Для линейной зависимости частоты от волнового вектора (**линейного закона дисперсии**  $\omega = ck$ ) групповая и фазовая скорости совпадают:  $u = c$ , так же как и относительное изменение частоты  $\omega$ , волнового вектора  $k$  и длины волны  $\lambda$ :

$$\frac{d\omega}{\omega} = \frac{dk}{k} = \frac{d\lambda}{\lambda}.$$

Рис. 2.2. Волновой пакет движется со скоростью  $u = d\omega / dk$ .

Важно отметить, что энергия волны, пропорциональная квадрату амплитуды, распространяется, как и максимум амплитуды, с групповой скоростью.

Скорость движения частицы определяется ее импульсом  $p = mv$  и связана с энергией  $E = E(p)$ . В то же время скорость движения частицы как волны — есть групповая скорость движения волнового пакета  $u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$  (скорость перемещения главного максимума

волновой функции), описывающего эту частицу. В квазиклассическом приближении волновой пакет перемещается в пространстве по классической траектории со скоростью движения частицы.

Подчеркнем, что при нелинейном законе дисперсии (нелинейной зависимости  $\omega(k)$ ) групповая скорость не равна фазовой, как и в рассматриваемом случае свободной частицы.

**Важные следствия из модели, описывающей движение частицы как движение волнового пакета**

1) Квадрат амплитуды волнового пакета (рис. 2.2)

$$C^2(x, t) = C^2(\eta) = C_0^2 \frac{\sin^2 \eta}{\eta^2},$$

где  $\eta = \Delta\omega(t - x/u)/2$ , пропорционален вероятности нахождения частицы в точке  $(x, t)$ . Из рис. 2.2 видно, что область локализации волнового пакета не является точечной: с наибольшей вероятностью частица находится в окрестности главного максимума. Обычно размер области локализации  $\Delta\eta_{\text{loc}}$  принимают равным половине расстояния между первыми нулями функции  $C^2(\eta)$ , то есть  $\Delta\eta_{\text{loc}} \approx \pi$ .

2) В фиксированный момент времени (например, при  $t = 0$ )  $\eta = -x\Delta k/2$ . Отсюда следует, что условие  $\Delta\eta_{\text{loc}} \approx \pi$ , записанное через пространственную координату  $x$ , определяет **область  $\Delta x_{\text{loc}}$  пространственной локализации волнового пакета** (рис. 2.2):

$$\Delta x_{\text{loc}} \Delta k \approx 2\pi, \quad (2.13)$$

или, так как  $p = \hbar k$ ,

$$\Delta p_x \Delta x_{\text{loc}} \approx 2\pi\hbar, \quad (2.14)$$

где  $\Delta k$  — интервал волновых чисел, соответствующих волновому пакету.

Аналогично, положив в условии  $\Delta\eta_{\text{loc}} \approx \pi$ , определяющем размер волнового пакета,  $x = \text{const}$  (например,  $x = 0$ ) при произвольном  $t$ , и учитывая, что  $\omega'_0 \cdot \Delta k \equiv \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k=k_0} \cdot \Delta k = \Delta\omega$ , получим соотношение:

$$\Delta\omega \Delta t \approx 2\pi,$$

из которого следует, например, что установить экспериментально наличие монохроматической волны  $\Delta\omega = 0$  можно только за бесконечно большое время  $\Delta t \rightarrow \infty$ .

Так как  $E = \hbar\omega$ , то соотношение неопределенностей

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx 2\pi\hbar \quad (2.15)$$

трактруется как невозможность точного определения энергии квантовой частицы за ограниченный интервал времени ( $\Delta E$  — неопределенность энергии, измеряемой в течение времени  $\Delta t$ ).

В общем случае для оценки обычно используют соотношения

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar, \quad \Delta p_y \Delta y \sim \hbar, \quad \Delta p_z \Delta z \sim \hbar. \quad (2.16)$$



Приближенные равенства (2.13) – (2.14) являются следствиями соотношений неопределенностей, открытых в 1927 г. немецким физиком В. Гейзенбергом.

Пусть среднее значение координаты  $x$  частицы равно  $\langle x \rangle$ , импульса  $-\langle p_x \rangle$ , тогда средняя квадратичная флуктуация координаты

$$\delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

и импульса

$$\delta p_x = \sqrt{\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}.$$

**Соотношение неопределенностей** Гейзенберга устанавливает связь между  $\delta x$  и  $\delta p_x$ :

$$\delta p_x \delta x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.17)$$

Соотношение (2.17) является математическим выражением наличия у частиц как корпускулярных, так и волновых свойств.

Второе соотношение неопределенностей Гейзенберга

$$\delta E \delta t \geq \hbar. \quad (2.18)$$

Соотношение (2.17) накладывает ограничение на точность одновременного определения импульса  $\delta p_x$  и координаты  $\delta x$  микрочастицы, соотношение (2.18) – на точность определения энергии  $\delta E$  в течение времени  $\delta t$ .

Таким образом, соотношения неопределенностей устанавливают пределы применимости классической физики.

Описывая реальную систему классическими методами и параметрами (координата и импульс), мы используем некоторое приближение, а соотношение неопределенностей показывает степень его справедливости.

Это означает, что поведение микрочастиц (в частности, электронов в металлах) нельзя рассматривать на основе классических законов, если характерные размеры системы (межатомное расстояние и размеры кристалла) сравнимы с длиной волны де Бройля  $\lambda = 2\pi\hbar/p$  частиц. Реальные микрочастицы не ведут себя подобно точечным частицам классической физики. Классическое описание

движения микрочастиц с использованием таких понятий, как закон движения, траектория движения, является лишь приближенным.

**Задача 2.5.** Оцените минимально возможную энергию электрона в атоме водорода.

**Решение.** Минимальная энергия частицы (энергия основного состояния) в квазиклассическом приближении определяется величиной минимального импульса  $\Delta p$ :

$$E = \frac{\Delta p^2}{2m}.$$

В соответствии с соотношением неопределенностей Гейзенберга минимально возможное значение импульса  $\Delta p$  связано с размером области локализации частицы.

Выберем систему отсчета, связанную с ядром атома, тогда:

$$\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = 0,$$

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z \approx 2r.$$

В этом случае, выражения определяющие неопределенности проекций импульса на декартовы оси координат, могут быть записаны в виде:

$$\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z \approx \frac{\hbar}{2r}. \quad (2.19)$$

Значение кинетической энергии, связанное с неопределенностью импульса  $\Delta p$ :

$$E_k = \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{\Delta p_x^2 + \Delta p_y^2 + \Delta p_z^2}{2m} = \frac{3}{2m} \left( \frac{\hbar}{2r} \right)^2.$$

Учитывая также потенциальную энергию, получаем следующее выражение для полной энергии атома, которая является функцией расстояния  $r$  от ядра до электрона:

$$E(r) = \underbrace{\frac{3}{2m} \left( \frac{\hbar}{2r} \right)^2}_{E_k} - \underbrace{\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}}_U. \quad (2.20)$$

Приравняв нулю первую производную  $E(r)$ , найдем эффективное расстояние  $r$ , соответствующее минимальному значению полной энергии атома:

$$\frac{dE(r)}{dr} = -\frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{mr^3} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = 0.$$

Следовательно,

$$r = \frac{3\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}.$$

Подставляя полученное выражение для  $r$  в (2.20), находим отличное от нуля значение минимальной энергии атома в основном состоянии:

$$E = -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{2me^4}{3\hbar^2} \approx -2,9 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} = -18 \text{ эВ}.$$

**Ответ.**  $E_{\min} = -2,9 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}.$

**Замечания.** 1. Полученное значение несколько меньше точного значения  $E \approx -2,18 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} = -13,6 \text{ эВ}$  минимальной энергии атома водорода. Это связано с тем, что в основе решения задачи лежит принцип неопределенности, который позволяет получить *принципиальный* предел значений неопределенности величин импульса  $\Delta p$  при заданной неопределенности координаты  $\Delta x$ . Фактически – это оценка, позволяющая установить порядок физических величин.

2. На основании соотношения неопределенностей значение энергии электрона в атоме по порядку величины получилась близким к истинному значению. Поэтому можно сделать вывод, что классическое описание движения внутри атома оказывается невозможным.

**Задача 3.6.** Частица может смещаться по оси  $OX$ , а положение равновесия находится в точке с координатой  $x = 0$  (например, равновесное положение атома в молекуле). Масса частицы  $m$ . При отклонении частицы из положения равновесия на нее действует возвращающая сила, пропорциональная отклонению ( $F \sim x$ ), коэффициент пропорциональности  $k_{\Gamma}$ . Оценить, используя соотношения неопределенностей, неопределенность энергии  $E$  частицы.

Получить численное значение  $E_1$  для случая, когда в качестве частицы рассматривается груз, прикрепленный к одному из концов

стальной пружины, другой конец которой закреплен. Масса груза  $m_1 = 50 \text{ г}$ , коэффициент Гука пружины  $k_{\Gamma 1} = 0,66 \cdot 10^8 \text{ Н/м}$ .

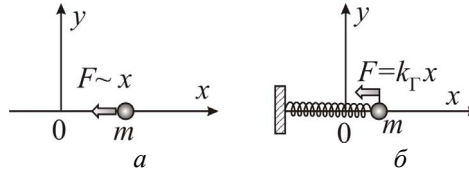


Рис. 2.3.  $x = 0$  – положение равновесия частицы (атома в молекуле (а) или груза на пружинке (б)), при отклонении от положения равновесия возникает возвращающая сила  $F \sim x$ .

**Решение.** В квантовой интерпретации заданная в условии задачи координата частицы — есть положение главного максимума  $|\Psi(x, t)|^2 = C^2$ . Полуширина максимума  $\delta x$  (среднеквадратичное отклонение от среднего значения) связана соотношением неопределенностей с неопределенностью импульса  $\delta p$  (2.17):

$$\delta p \approx \frac{\hbar}{2\delta x}. \quad (2.21)$$

Поскольку частица покоится, то средние значения импульса и координаты равны нулю, и величину механической энергии оценим по формуле

$$E = \frac{(\delta p)^2}{2m} + \frac{k_{\Gamma}(\delta x)^2}{2}, \quad (2.22)$$

где  $\delta p$  и  $\delta x$  — неопределенности импульса и координаты частицы.

Так как  $\delta x$  мало, а возвращающая сила по условию является линейной функцией отклонения от положения равновесия ( $F \sim x$ ), то колебания можно считать гармоническими. Для таких колебаний среднее значение кинетической энергии равно среднему значению потенциальной:

$$\frac{(\delta p)^2}{2m} = \frac{k_{\Gamma}(\delta x)^2}{2}. \quad (2.23)$$

Решая систему уравнений (2.21) и (2.23), находим:

$$(\delta x)^2 = \frac{\hbar}{2\sqrt{k_{\Gamma}m}}.$$

Подставляя данное значение  $(\delta x)^2$  в (2.22) и учитывая (2.23), получаем величину неопределенности энергии частицы:

$$E = k_{\Gamma}(\delta x)^2 = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k_{\Gamma}}{m}}.$$

Как будет показано ниже (в гл. 3), полученное значение есть **энергия нулевых колебаний квантового гармонического осциллятора**:

$$E = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k_{\Gamma}}{m}} = \frac{\hbar \omega}{2},$$

где  $\omega = \sqrt{k_{\Gamma}/m}$  — частота собственных гармонических колебаний частицы.

При подстановке численных данных находим минимальное значение энергии для груза на стальной пружине:

$$E_1 = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k_{\Gamma 1}}{m_1}} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{2} \sqrt{\frac{0,66 \cdot 10^8}{5 \cdot 10^{-2}}} \approx 2 \cdot 10^{-30} \text{ Дж}.$$

$$\text{Ответ. } E = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k_{\Gamma}}{m}} = \frac{\hbar \omega}{2}, \quad E_1 = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k_{\Gamma 1}}{m_1}} \approx 2 \cdot 10^{-30} \text{ Дж}.$$

**Замечание.** Как и следовало ожидать, для макроскопического объекта (груз на пружинке), абсолютные значения неопределенности энергии являются пренебрежимо малыми величинами.

**Задача 2.7.** Частица массой  $m$  находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими «стенками» (см. рис. 2.4). Ширина ямы  $l$ . Оценить на основании соотношения неопределенностей:

- 1) минимально возможную энергию частицы;
- 2) силу давления частицы на стенку ямы при минимально возможной энергии.

**Решение.** Направим ось координат  $Ox$  так, как показано на рис. 2.4. В данном случае можно считать, что среднее значение координаты  $x$  частицы равно  $\langle x \rangle = l/2$ , и неопределенность координаты равна  $\delta x \approx l/2$ . Учитывая условие минимальности энергии, можно считать, что значение проекции импульса  $p_x$  приблизительно равно его неопределенности  $\delta p_x$ :  $p_x \approx \delta p_x$  (см. задачу 2.5).

Тогда на основании принципа неопределенности Гейзенберга можно записать  $\delta p_x \cdot \delta x \approx \hbar/2$  (2.17) и, следовательно,  $\delta p_x \approx \hbar/l$ .

По условию задачи внутри ямы потенциальная энергия равна нулю, и минимальная полная энергия частицы в яме определяется с помощью соотношения:

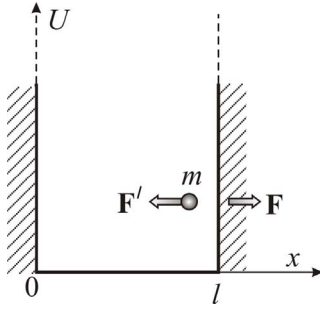


Рис. 2.4. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими «стенками». Ширина ямы  $l$ .

$$E = \frac{\delta p_x^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ml^2}. \quad (2.24)$$

Для нахождения силы  $F$ , действующей на стенки потенциальной ямы со стороны частицы, используем **принцип виртуальной работы**. Предположим, что одна из стенок ямы под действием искомой виртуальной силы  $F$  сместилась на бесконечно малое расстояние  $dl$ .

Со стороны «стенки» на частицу действует такая же по величине, но противоположная по направлению сила  $F'$  (по III закону Ньютона). По закону изменения механической энергии для частицы записываем

$$dE = F'dl. \quad (2.25)$$

Из (2.24) находим изменение кинетической энергии

$$dE \approx -\frac{\hbar^2}{ml^3} dl$$

и, подставляя в (2.25), получаем  $F'dl \approx -\frac{\hbar^2}{ml^3} dl$ . Отсюда

$$F = -F' \approx \frac{\hbar^2}{ml^3} > 0,$$

то есть частица давит на стенку, а стенка отталкивает частицу с силой

$$F' \approx -\frac{\hbar^2}{ml^3}.$$

**Ответ.** 1)  $E \approx \hbar^2/(2ml^2)$ , 2) сила, удерживающая частицу в яме,  $F \approx \hbar^2/(ml^3)$ .

### §2.3. Волновая функция частицы и ее вероятностная интерпретация

**Задача 2.8.** Волновая функция некоторой частицы, движущейся вдоль оси  $OX$ , имеет вид  $\psi(x,t) = Cxe^{i(\omega t - kx)}$  (рис. 2.5). При  $x < 0$  и при  $x > b > 0$  значение  $C = 0$ . Определить значение  $C$  при  $0 \leq x \leq b$ . Найти:

- 1) плотность вероятности, с которой частицу можно обнаружить в точке с координатой  $x = b$ ;
- 2) средние значения  $x$  и  $x^2$  в интервале  $[0, b]$ .

**Решение.** 1) Прежде всего, необходимо осуществить нормировку волновой функции

$$\int_{sp} \Psi(r,t) \Psi^*(r,t) dr = 1.$$

Поскольку

волновая функция отлична от нуля только при  $0 \leq x \leq b$ , то интеграл отличен от нуля лишь для данного диапазона. Положим  $C = a = \text{const}$  в интервале  $0 \leq x \leq b$ . Подставляя волновую функцию в условие нормировки, находим

$$\int_0^b a x e^{i(\omega t - kx)} (a x e^{i(\omega t - kx)})^* dx = 1,$$

$$\int_0^b (ax)^2 dx = \frac{C^2 b^3}{3} = 1 \quad \text{и}$$

$$a = \sqrt{3/b^3}.$$

Таким образом, плотность вероятности обнаружения частицы в точке с координатой  $x$  определяется выражением (рис. 2.5):

$$|\Psi(x)|^2 = (ax)^2 = \frac{3}{b^3} x^2.$$

При  $x = b$  плотность вероятности  $|\Psi(x)|^2 = 3/b$ .

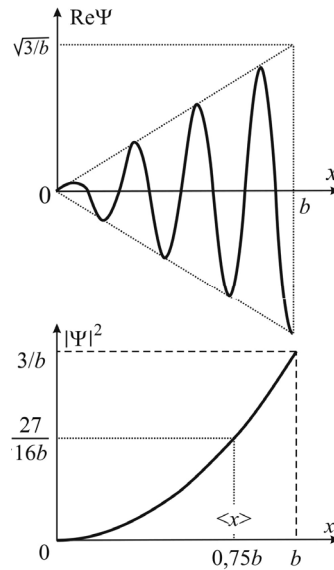


Рис. 2.5. Зависимости  $\text{Re}\Psi(x)$  и  $|\Psi(x)|^2$  для волновой функции, заданной в условии задачи 2.8.

2) Используя формулу для вычисления среднего значения

$$\langle \varphi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \cdot f(x) dx,$$

где  $f(x)$  — функция плотности вероятности для  $x$ , получаем:

$$\langle x \rangle = \int_0^b x |\Psi(x)|^2 dx = \int_0^b \frac{3}{b^3} x^3 dx = \frac{3}{4} b;$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^b x^2 |\Psi(x)|^2 dx = \int_0^b \frac{3}{b^3} x^4 dx = \frac{3}{5} b^2.$$

**Ответ.**  $C = \sqrt{3/b^3}$ , 1)  $|\Psi(x)|^2 = 3x^2/b^3$ , 2)  $\langle x \rangle = 3b/4$ ,  $\langle x^2 \rangle = 3b^2/5$ .

**Задача 2.9.** Волновая функция частицы имеет вид

$$\Psi(x, t) \sim \exp\left[-(x/a)^2 + i(\omega t + bx)\right]. \quad (2.26)$$

Изобразить графически вид функций  $\text{Re} \Psi(x)$  и  $|\Psi(x)|^2$  в момент времени  $t = 0$ . Найти границы области локализации частицы. Считать  $a$  и  $b$  известными постоянными.

**Решение.** Константа  $C$  волновой функции

$$\Psi(x, t) = C \exp\left[-\left(\frac{x}{a}\right)^2 + i(\omega t + bx)\right]$$

определяется из условия нормировки  $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = 1$ . Ис-

пользуя табличное значение интеграла  $\int_0^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}/2$ , находим:

$$\Psi(x, t) = \left[\frac{2}{\pi a^2}\right]^{1/4} \exp\left[-(x/a)^2 + i(\omega t + bx)\right]. \quad (2.27)$$

1) Запишем волновую функцию (2.27) частицы в момент времени  $t = 0$ :



$$\Psi = C \exp \left( -\left(\frac{x}{a}\right)^2 + ibx \right) = C e^{-(x/a)^2} e^{ibx}.$$

Используя формулу Эйлера  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$ , находим действительную часть волновой функции:

$$\operatorname{Re} \Psi = C e^{-(x/a)^2} \cos(bx) = A(x) \cos(bx), \quad (2.28)$$

где

$$A(x) = \left[ \frac{2}{\pi a^2} \right]^{1/4} \exp \left[ -\left(\frac{x}{a}\right)^2 \right].$$

Таким образом,  $\operatorname{Re} \Psi(x)$  представляет собой гармоническую функцию  $\cos(bx)$ , модулированную по амплитуде экспоненциально убывающей функцией  $A(x)$ . Вид зависимости (2.28) представлен на рис. 2.6.

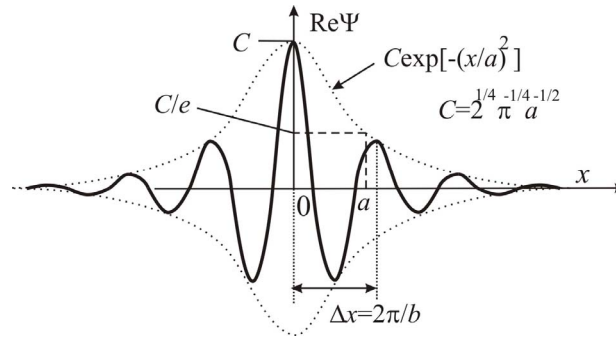


Рис. 2.6. Зависимость  $\operatorname{Re} \Psi(x)$  для волновой функции (2.26).

2) По определению, модулем комплексного числа  $z$  называется выражение  $z = \sqrt{z \cdot z^*}$ . Таким образом, исследуемую функцию  $|\Psi(x)|^2$  можно представить в виде:

$$|\Psi(x)|^2 = \Psi(x) \Psi^*(x) = \left( C e^{-(x/a)^2} \right)^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \exp \left[ -2 \frac{x^2}{a^2} \right].$$

Данное выражение представляет собой симметричную относительно оси ординат экспоненциально убывающую функцию, вид которой представлен на рис. 2.7.

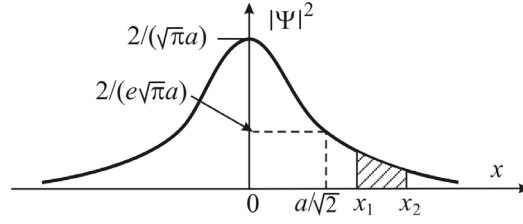


Рис. 2.7. Зависимость  $|\Psi(x)|^2$  для волновой функции (2.26).

Площадь под графиком  $|\Psi(x)|^2$  в интервале значений  $x_1 \leq x \leq x_2$  равна вероятности нахождения частицы в данном интервале значений координаты  $x$ . При  $x \rightarrow \pm\infty$  плотность вероятности  $|\Psi(x)|^2$  стремится к нулю. Таким образом, частицу можно считать локализованной в той области пространства, где плотность вероятности ее нахождения «существенно» отлична от нуля. Какая величина плотности вероятности является «существенной», а какая нет, определяется из условий конкретной задачи, однако чаще всего в качестве оценки границ области локализации частицы используются значения  $x_l$ , при которых плотность вероятности  $|\Psi(x)|^2$  уменьшается в  $e$  раз по сравнению с максимальным значением  $[\Psi(x)]^2_{\max}$ , т.е.

$$e \cdot |\Psi(x_l)|^2 = [\Psi(x_m)]^2. \quad (2.29)$$

В данной задаче максимальное значение плотности вероятности достигается при  $x_m = 0$  и равно

$$[\Psi(x_m)]^2 = |\Psi(0)|^2 = C^2. \quad (2.30)$$

Из (2.29) и (2.30) имеем  $e \cdot C^2 e^{-2(x_l/a)^2} = C^2$  и находим координаты границ области локализации частицы:

$$x_{\text{д}} = \pm \sqrt{a/2}.$$

**Ответ.** См. рис. 2.6 и 2.7;  $x_{\text{д}} = \pm \sqrt{a/2}$ .

## §2.4. Дифракция и интерференция частиц

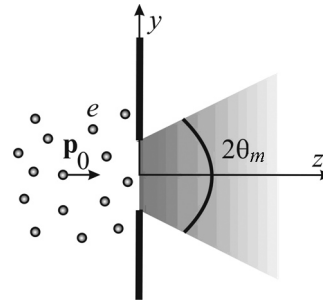
Как проверить справедливость гипотезы де Бройля? Как обнаружить волновые свойства частиц?

Если гипотеза справедлива, то должны наблюдаться **интерференция** и **дифракция** частиц, например дифракция электронов (корпускул) на щели, размеры которой сравнимы с длиной волны де Бройля для электронов. А длина волны определяется, в свою очередь, импульсом электронов: из (2.1) следует:

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

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}. \quad (2.31)$$

**Задача 2.10.** Плоский экран расположен перпендикулярно оси  $OZ$  и имеет узкую щель шириной  $b$  (рис. 2.8). На экран падает широкий пучок электронов с импульсами  $\mathbf{p} = p_0 \mathbf{e}_z$  ( $p_y = 0$ , а следовательно,



$\Delta y = \infty$ ). Интенсивность потока электронов столь мала, что можно пренебречь их взаимодействием и считать, что все электроны движутся к щели с одной и той же скоростью независимо друг от друга. Провести качественную оценку движения электронов, используя соотношение неопределенностей.

Рис. 2.8. Дифракция электронов, падающих перпендикулярно на экран со щелью.

**Решение.** При прохождении щели неопределенность координаты  $y$  становится равной ширине щели  $\Delta y = b$  или  $\delta y = b/2$ , что, по соотношению неопределенностей, автоматически означает появление неопределенности  $y$ -компоненты импульса порядка  $\delta p_y = \hbar/(2\delta y) = \hbar/b$ , т. е. появлению  $y$ -компоненты  $y$  импульса

$$p_y = \delta p_y = \hbar/b \quad (2.32)$$

и волнового вектора

$$k_y = \delta k_y = 1/b. \quad (2.33)$$

Неопределенность волнового вектора по координате  $y$  приводит к появлению отличной от нуля вероятности отклонения траектории движения электрона на угол  $\theta$ . В волновой интерпретации падающая плоская волна с волновым вектором  $\mathbf{k}$ , направленным вдоль оси  $OZ$ , дифрагирует с образованием плоских волн, движущихся под разными углами  $\theta$  к оси  $OZ$ , с интенсивностью, зависящей от  $\theta$ . В основном все траектории попадают в угол  $2\theta_m$ , соответствующий условиям (2.32) и (2.3).

Оценить угол дифракции можно, используя неопределенность импульса (или волнового вектора, см. рис. 2.9):

$$\operatorname{tg} \theta_m = \frac{\delta k_y}{k_z} = \frac{1/b}{2\pi/\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi b}. \quad (2.34)$$

Плотность вероятности для дифракции на угол  $\theta$  пропорциональна квадрату амплитуды волновой функции (2.4) и зависит от  $\theta$  (аналогично зависимости интенсивности дифрагированной электромагнитной волны, также пропорциональной квадрату амплитуды).

Расположим второй экран перпендикулярно оси  $OZ$  (см. рис. 2.9) с датчиками вдоль оси  $OX$ , регистрирующими число пролетающих электронов в единицу времени

$$\frac{dN(x)}{dt} = \frac{\delta N(x, x + \delta x)}{dt \cdot \delta x} \quad (\text{скорость счета}),$$

где  $\delta N(x, x + \delta x)$  – число зарегистрированных электронов за время  $dt$  на интервале  $(x, x + \delta x)$ .

Усредненная за большой промежуток времени картина распределения скорости счета регистрируемых электронов  $\langle dN(x) \rangle / dt$  представлена на рис. 2.10. Скорость счета – есть плотность вероятности попадания электронов в точку с координатой  $x$  на экране. Опытные факты подтверждают, что зависимость  $\langle dN(x) \rangle / dt$  имеет такой же графический вид, как и зависимость интенсивности от координаты экрана при дифракции электромагнитной волны.

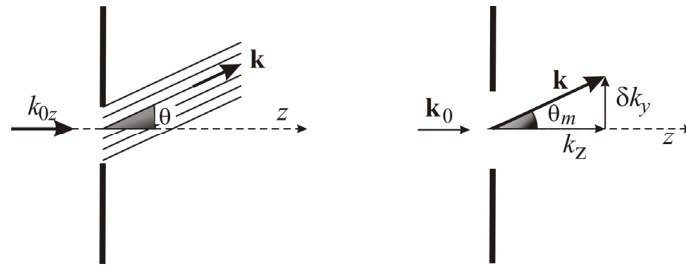


Рис. 2.9. В результате дифракции электронов, за щелью у волнового вектора электронов появляется составляющая  $k_y$ , и ненулевая вероятность отклонения от первоначального движения вдоль оси  $OZ$ .

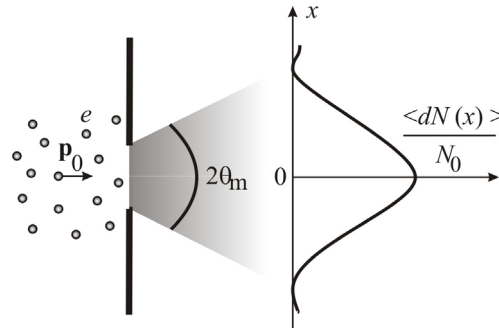


Рис. 2.10. Распределение скорости счета электронов по координате  $x$  имеет такой же вид, как распределение интенсивности при дифракции электромагнитных волн.

Плотности вероятности  $|\Psi(x)|^2$  в квантовой теории можно сопоставить интенсивность  $I(x)$  в классической теории.

С наибольшей плотностью вероятности, равной  $\langle dN(x)/dt \rangle$ , после дифракции частицы движутся в пределах угла  $2\theta_m$ .

**Ответ.** Наблюдается дифракция электронов. Угол дифракции (см. рис. 2.9)  $\text{tg}\theta_m = \lambda / (2\pi b)$ .

**Задача 2.11.** Параллельный пучок электронов, движущихся с одинаковой скоростью, падает нормально на диафрагму с узкой длинной прямоугольной щелью шириной  $b = 1$  мкм. Определите скорость  $v$  электронов, если на экране, отстоящем от щели на расстоянии  $L = 50$  см, ширина центрального дифракционного максимума равна  $H = 0,36$  мм (рис. 2.11).

**Решение.** Направление  $\theta_m$  на первый дифракционный минимум определяется из выражения:

$$b \sin \theta_m = \lambda,$$

где  $b$  ширина щели,  $\lambda$  – длина волны электрона. Эта формула получена из волновой теории.

Оценим тангенс угла дифракции:

$$\operatorname{tg} \theta_m = \frac{H/2}{L} = \frac{0,36 \cdot 10^{-3}}{2 \cdot 0,5} = 0,00036.$$

Угол  $\theta$  можно считать малым, поэтому  $\operatorname{tg} \theta_m \approx \sin \theta_m = \lambda/b$ , тогда (см. рис. 2.11):

$$\frac{H/2}{L} = \frac{\lambda}{b}.$$

С учетом (3.1)  $\lambda = \frac{h}{mv}$  полу-

чаем:

$$v = \frac{2hL}{mHb} = \frac{2 \cdot 6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 0,5}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 0,36 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-6}} = 2 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

**Ответ.**  $v = \frac{2hL}{mHb} = 2 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$

**Задача 2.12.** Электроны из состояния покоя ускоряются разностью потенциалов  $U = 25 \text{ В}$  и попадают нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, расстояние между которыми  $d = 50 \text{ мкм}$  (рис. 2.12). На экране, покрытом люминофором и расположенном на расстоянии  $L = 1 \text{ м}$  от плоскости диафрагмы, наблюдается интерференция электронных волн, дифрагированных на двух щелях. Определи-

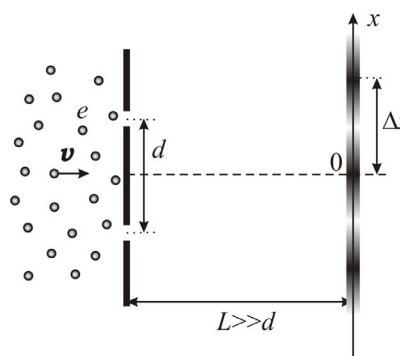


Рис. 2.12. Схема опыта по наблюдению дифракции электронов на двух щелях.

те расстояние между соседними максимумами интерференционной картины.

**Решение.** Схема опыта по наблюдению дифракции электронов, представленная на рис.2.12 аналогична схеме Юнга для наблюдения интерференции световых волн. В опыте Юнга расстояние  $\Delta x$  между соседними максимумами (и минимумами) интерференционной картины определяется соотношением:

$$\Delta x = \frac{\lambda L}{d},$$

Так как для электронов  $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}$  (см. задачу 2.3), то

$$\Delta x = \frac{2\pi\hbar L}{d\sqrt{2meU}} = \frac{2\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 1}{50 \cdot 10^{-6} \sqrt{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 25}} \approx 5 \cdot 10^{-6} \text{ м.}$$

**Ответ:**  $\Delta x = \frac{2\pi\hbar L}{d\sqrt{2meU}} \approx 5 \text{ мкм.}$

### Вопросы для самопроверки

1. Если концентрация частиц в потоке мала, так что можно считать, что частицы попадают на экран со щелями по одной, то каждая частица проходит через какую-либо одну щель. В этом случае можно ожидать дифракцию электронных волн, но интерференции волн, вышедших из разных щелей не должно быть. Так ли это?

2. Пусть в схеме с двумя щелями пролетело  $N_0 = 10$  электронов. Можно ли предсказать заранее, какая часть из них после дифракции попадет в область  $-\lambda/100 \leq x \leq \lambda/100$ ?

**Ответы.**

1. Действительно, частица проходит через какую-то одну щель, но определить через какую, поставив, например, регистрирующий прибор за одной из щелей, невозможно, не нарушив при этом картину дифракции. Поэтому волна де-Бройля электрона проходит через обе щели сразу, и наблюдаемая картина является дифракционно-интерференционной. Интерференционная картина наблюдается даже в том случае, когда электроны подлетают к щелям с частотой 1 электрон в секунду. Для наблюдения такой картины необходимо достаточно много времени (несколько суток).

2. Нет, нельзя, так как любое число от нуля до десяти может попасть в выделенный интервал  $\Delta$ . Однако можно оценить среднее значение числа частиц (при бесконечно большом числе опытов):

$$\langle N_{\Delta} \rangle = N_0 \int_{-\lambda/100}^{\lambda/100} |\Psi(x)|^2 dx.$$

**Задача 2.13.** Параллельный пучок атомов водорода, движущихся со скоростью  $v$ , падает нормально на экран с узкой щелью, за которым на расстоянии  $L$  расположен экран регистрации. Оценить ширину щели  $b$ , при которой ширина ее изображения на экране будет минимальной.

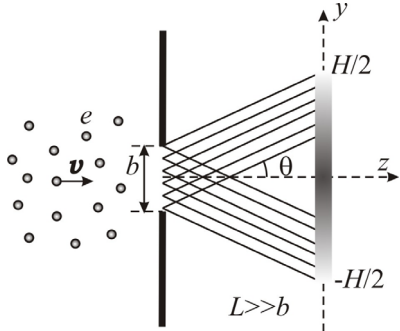


Рис. 2.13. Электронные волны после дифракции при максимальном отклонении от направления первоначального движения вдоль оси  $OZ$ .

**Решение.** Используя принцип корпускулярно-волнового дуализма, рассмотрим поток атомов водорода как плоскую волну, падающую на экран со щелью (см. задачу 2.11). Изобразим две волны, дифрагировавшие под максимальным углом  $\theta_m$  (рис. 2.13).

Ширина изображения на экране определяется углом дифракции  $\theta_m$ , размером щели, а также расстоянием до экрана.

Учитывая геометрию опыта (см. рис. 2.13) и приближение  $\text{tg}\theta_m \approx \sin\theta_m = \lambda/b$ , можно записать следующее выражение:

$$\frac{H}{2} = \frac{b}{2} + L \text{tg}\theta_m = \frac{b}{2} + L \frac{\lambda}{b}.$$

Таким образом, ширина изображения является функцией размера щели:

$$H(b) = b + 2L\lambda/b. \quad (2.35)$$

Для нахождения размера щели  $b^*$ , при котором значение функции  $H(b)$  минимально, приравняем нулю первую производную  $H(b)$ :



$$\left. \frac{dH(b)}{db} \right|_{b=b^*} = 1 - \frac{2L\lambda}{b^{*2}} = 0.$$

Находим  $b^* = \sqrt{2\lambda L}$ , а учитывая, что  $\lambda = 2\pi\hbar / (mv)$ , получаем:

$$b^* = \sqrt{2\lambda L} = 2\sqrt{\frac{\pi L\hbar}{mv}}.$$

Подставляя значение  $b^*$  в (3.27), получаем выражение, определяющее минимальную ширину изображения:

$$H^* = b^* + \frac{2\lambda L}{b^*} = 4\sqrt{\frac{\pi L\hbar}{mv}}.$$

**Ответ.**  $b^* = 2\sqrt{\frac{\pi L\hbar}{mv}}.$

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D2.1.** Молекулы йода  $I_2$  находятся в газообразном состоянии при температуре  $227^\circ\text{C}$ . Оценить длину волны де Бройля молекул, имеющих наиболее вероятную скорость. Молярная масса атомов йода  $M_I = 127$  г/моль.

**Ответ.**  $\lambda = \frac{\sqrt{N_A \pi \hbar}}{\sqrt{M_I k_B T}} \approx 0,08 \text{ \AA}.$

**Задача D2.2.** Температура идеального газа  $T$ . Масса молекул  $m$ . Найти функцию плотности вероятности распределения молекул по длинам волн де Бройля и наиболее вероятное значение длины волны де Бройля  $\lambda_{\text{нв}}$ .

**Ответ.** См. рис.2.14, где  $\Delta_{1/2}$  – ширина кривой на половине от максимального значения плотности вероятности;

$$f(\lambda) = 8\sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\lambda_{\text{нв}}^3}{\lambda^4} \exp\left[-2(\lambda_{\text{нв}}/\lambda)^2\right], \text{ где } \lambda_{\text{нв}} = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{mk_B T}}.$$

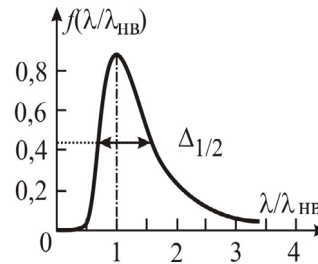


Рис.2.14. Зависимость плотности вероятности распределения молекул от длины волны де Бройля.

**Задача D2.3.** Идеальный газ, состоящий из молекул массы  $m$  находится при температуре  $T$ . Найти кинетическую энергию молекул с наиболее вероятной длиной волны де Бройля?

**Ответ.**  $E_{\text{нв}} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m\lambda_{\text{нв}}^2} = 2k_{\text{В}}T$ , где  $\lambda_{\text{нв}} = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{mk_{\text{В}}T}}$  (см. задачу

D2.2).

**Задача D2.4.** Кинетическая энергия свободного электрона  $E_0 = 10$  эВ. Длина волны де Бройля у электрона возросла в  $\alpha = 2$  раза. На сколько изменилась энергия?

**Ответ.**  $\Delta E = -(1 - 1/\alpha^2)E_0 = -7,5$  эВ.

**Задача D2.5.** Пучок электронов падает нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, расстояние между которыми  $d = 10$  мкм. Расстояние между соседними дифракционными максимумами на экране, отстоящем от диафрагмы на расстоянии  $l = 75$  см, равно  $\Delta x = 7,5$  мкм. Найдите кинетическую энергию электронов.

**Ответ.**  $E = \frac{2}{m} \left( \frac{\pi\hbar l}{\Delta x d} \right)^2 = 1,6$  эВ.

## Глава 3

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

## §3.1. Атом водорода. Модель Резерфорда–Бора

**Постулаты Бора** — основные допущения, сформулированные Нильсом Бором в 1913 г. для объяснения закономерности линейчатого спектра атома водорода и водородоподобных ионов и квантового характера испускания и поглощения света. Бор исходил из планетарной модели атома Резерфорда:

1) Атом может находиться только в особых стационарных квантовых состояниях, каждому из которых отвечает определенная энергия. В стационарном состоянии атом не излучает электромагнитных волн.

Состояниям атома соответствует дискретный набор значений энергии  $E_n$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$

2) Момент импульса  $\mathbf{M} = [\mathbf{rp}]$  электрона на стационарной орбите кратен постоянной Планка (**условие квантования**):

$$M_n = n \cdot \hbar. \quad (3.1)$$

Для круговой орбиты условие квантования  $r_n p = n \cdot \hbar$  совместно с уравнением де Бройля  $p = \hbar k$  приводит к следующим следствиям.

*Во-первых*, на длине круговой орбиты электрона  $2\pi r_n$  должно укладываться целое число  $n$  длин волн

$$2\pi r_n = n \cdot \lambda.$$

*Во-вторых*, набег фазы при совершении одного оборота  $k \cdot (2\pi r_n)$  должен быть равен целому числу  $2\pi$ :

$$k \cdot (2\pi r_n) = n \cdot 2\pi. \quad (3.2)$$

Неизменность фазы при совершении оборотов означает, что вращение «не влияет» на вид волновой функции, и она остается неизменной во времени (стационарной).

Уравнение (3.2), умноженное на  $\hbar$ , является частным случаем **правила квантования Бора–Зоммерфельда** для периодического движения частицы в потенциальном поле:

$$\oint pdq = 2\pi\hbar n \text{ (постулат Бора–Зоммерфельда)}, \quad (3.3)$$

где  $p$  и  $q$  — обобщенные импульс и координата частицы,  $n$  — целые числа. Обобщенные координаты могут быть просто декартовыми координатами, но не обязательно. Любые величины  $q_1, q_2, \dots, q_s$ , характеризующие положение в пространстве системы, обладающей  $s$  степенями свободы, называются обобщенными координатами, а  $\dot{q}_i$  — обобщенными скоростями.

Постулат Бора–Зоммерфельда (3.3) определяет стационарные состояния системы и сопоставляет им целые числа  $n$ .

3) При переходе атома из состояния с энергией  $E_{n1}$  в состояние с  $E_{n2}$  атом испускает или поглощает фотон с энергией

$$\hbar\omega = |E_{n2} - E_{n1}|. \quad (3.4)$$

Два постулата (3.3) и (3.4) совместно с классическим уравнением движения электрона в атоме приводят к правильному описанию строения водородоподобных атомов.

**Задача 3.1. (Полуклассическая модель атома Бора.)** В рамках модели Резерфорда–Бора, используя классическое описание движения, найти для атома водорода:

- 1) радиусы боровских электронных орбит и спектр возможных значений энергии;
- 2) кинематические характеристики движения электрона (скорость, ускорение, частоту вращения).

**Решение.** Запишем систему уравнений, содержащую три соотношения.

1. Уравнение движения электрона (как материальной точки с массой  $m = 0,9 \cdot 10^{-30}$  кг и зарядом  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл) по окружности радиуса  $r$  со скоростью  $v$  (в нерелятивистском приближении,  $v \ll c$ ) в поле неподвижного ядра с зарядом  $Ze$  под действием кулоновской силы:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (3.5)$$

2. Второе уравнение является следствием из постулата Бора–Зоммерфельда: на длине окружности (траектории) должно укладываться целое число  $n$  длин волн де Бройля (3.3)

$$2\pi r = n\lambda. \quad (3.6)$$

3. Третье соотношение — уравнение де Бройля, связывающее импульс и волновой вектор электрона (2.1):

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad \text{или} \quad mv = \hbar \frac{2\pi}{\lambda}.$$

1) Решая систему из трех записанных выше уравнений, для боровского атома получаем:

$$\text{радиус орбиты:} \quad r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2 Z} n^2; \quad (3.7)$$

$$\text{кинетическая энергия:} \quad \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}; \quad (3.8)$$

$$\text{потенциальная энергия:} \quad -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^4 Z^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}; \quad (3.9)$$

$$\text{полная энергия:} \quad E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (3.10)$$

Число  $n = 1, 2, 3, \dots$ , входящее в соотношения (3.6)–(3.10), называется **главным квантовым числом**.

Низший уровень энергии, соответствующий  $n = 1$ , определяет энергию основного (невозбужденного) состояния атома водорода:

$$E_1 = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_B} \approx 13,6 \text{ эВ}, \quad (3.11)$$

где

$$a_B = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{me^2} = 0,53 \text{ \AA} \quad (3.12)$$

— боровский радиус первой ( $n = 1$ ) орбиты электрона в атоме водорода ( $Z = 1$ ).

Модуль  $|E_n|$  **энергия связи** электрона с ядром на уровне  $n$ :

$$E_{св}(n) \equiv |E_n|.$$

Минимальная энергия (работа), которая необходима, чтобы удалить один электрон с внешней оболочки нейтрального атома и ионизовать атом, называется **энергией ионизации атома**. Ее назы-

вают также **первым потенциалом ионизации**. Энергию, необходимую для удаления второго электрона, называют **вторым потенциалом ионизации**.

Для атома водорода, который находится в основном состоянии при ( $n = 1$ ), потенциал ионизации максимален и равен

$$I_i = -E_1 = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{2a_B} \approx 13,6 \text{ эВ}.$$

Величину энергии, равную первому потенциалу ионизации атома, применяют в атомной физике и оптике в качестве *единицы измерения энергии*, называемой **ридбергом** в честь шведского физика Й.Р. Ридберга:

$$Ry = I_i = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6057 \text{ эВ}. \quad (3.13)$$

Первый потенциал ионизации, или ридберг, связан с фундаментальной физической константой — **постоянной Ридберга**  $R_\infty$ , введенной Ридбергом при изучении спектров излучения атомов:

$$R_\infty = \frac{Ry}{2\pi\hbar c} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{me^4}{4\pi\hbar^3} \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}.$$

Эта постоянная записана в предположении бесконечно большой массы ядра (индекс  $\infty$  у  $R$ ) по сравнению с массой электрона.

Энергию  $E_n$  электрона и радиус электронной орбиты  $r_n$  на  $n$ -ом энергетическом уровне в атоме водорода можно записать, используя постоянные (3.12) и (3.13):

$$E_n = -\frac{R_\infty}{n^2}, \quad (3.14)$$

$$r_n = a_B \cdot n^2, \quad (3.15)$$

Таким образом, энергия стационарных состояний  $E_n$  определяется их порядковым номером  $n$  (см. рис. 3.1). Самый нижний, первый ( $n = 1$ ) уровень соответствует основному состоянию атома водорода с максимальной энергией связи электрона с ядром:

$$E_1 = -R_\infty. \quad (3.16)$$

При  $n \rightarrow \infty$  радиус орбит растет и энергия связи стремится к нулю  $E_n \rightarrow 0$ . Значению полной энергии, равной нулю, соответствует орбита с бесконечно большим радиусом, то есть орбита сво-

бодного электрона. Расположение энергетических уровней для разных значений квантовых чисел  $n$  (1, 2, 3, 4) представлено на рис. 3.1.

2) **Вычисление кинематических характеристик.**

Из (4.8) для скорости электрона на  $n$ -й орбите получаем:

$$v_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\hbar} \cdot \frac{ze^2}{n}, \quad (3.17)$$

т. е. *скорость* электрона в атоме водорода максимальна на первой орбите:

$$v_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \approx 2,2 \cdot 10^6 \text{ м/с}. \quad (3.18)$$

Заметим, что  $v_1 \ll c$ , как и предполагалось в условии задачи.

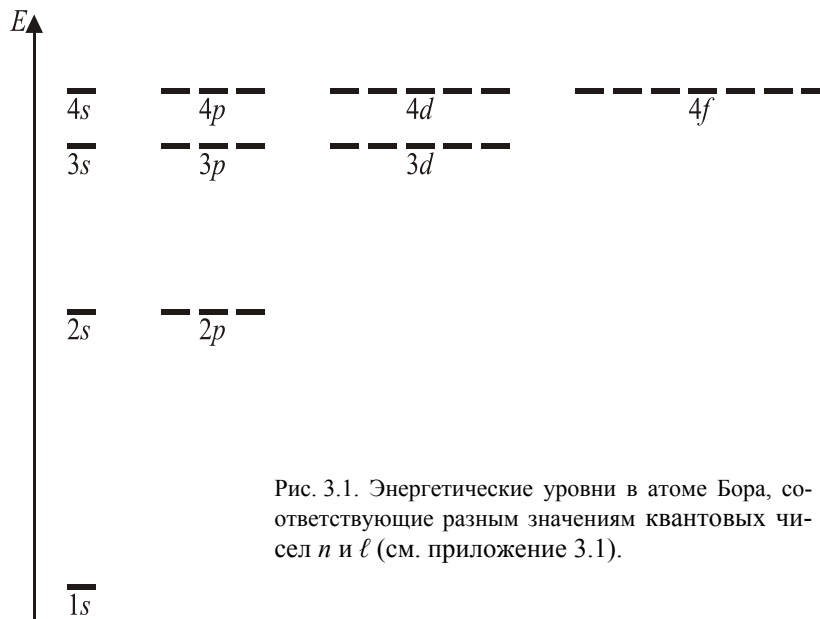


Рис. 3.1. Энергетические уровни в атоме Бора, соответствующие разным значениям квантовых чисел  $n$  и  $\ell$  (см. приложение 3.1).

*Частота вращения* электрона вокруг ядра равна

$$\omega_n = 2\pi \frac{v_n}{2\pi r_n} = \frac{v_n}{r_n} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{z^2 m e^4}{\hbar^3 n^3}; \quad (3.19)$$

для основного состояния атома водорода

$$\omega_1 = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{me^4}{\hbar^3} \approx 6,6 \cdot 10^{15} \text{ рад/с}. \quad (3.20)$$

Центростремительное ускорение

$$a_1 = \frac{v_1^2}{r_1} \approx 9 \cdot 10^{22} \text{ м/с}^2 \quad (3.21)$$

обеспечивается кулоновским полем ядра с напряженностью электрического поля

$$\mathcal{E}(r_1) = ma_1 / e \approx 5 \cdot 10^{11} \text{ В/м}. \quad (3.22)$$

**Примечание.** Поскольку ядро значительно тяжелее электрона, то негласно при решении задачи 3.1 считалось, что ядро покоится, а движется только электрон.

**Вывод:** Модель Бора является полуклассической, так как использует как классическое описание движения электрона (уравнение движения), так и квантовое (квантовые постулаты Бора).

**Задача 3.2. (Боровская орбита).** Амплитуда волновой функции электрона в атоме водорода в основном состоянии

$$\Psi(r) = A \exp[-r / a_B]. \quad (3.23)$$

Определить вероятность  $f_m$ , с которой электрон находится на орбите с радиусом  $a_B$  и ширину сферического слоя  $\Delta$ , внутри которого вероятность нахождения электрона больше половины от максимального значения.

**Решение.** Константу  $A$  в (3.23) находим из условия нормировки:

$$\int |\Psi(r)|^2 d\tau_r = 1, \quad (3.24)$$

где  $d\tau_r = 4\pi r^2 dr$  — объем сферического слоя. Подставляя

$\Psi = A \exp(-r/a_B)$  в (3.24) и интегрируя по частям, находим:

$$A = 1/\sqrt{\pi a_B^3}$$

и

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} \exp[-r / a_B]. \quad (3.25)$$



Плотность вероятности обнаружения электрона на удалении  $r$  от ядра, т. е. в сферическом слое  $d\tau_r = 4\pi r^2 dr$  (см. рис 3.2), имеет вид

$$f(r) = |\Psi(r)|^2 4\pi r^2 = \frac{4}{a_B^3} r^2 \exp\left[-\frac{2r}{a_B}\right]. \quad (3.26)$$

Максимальное значение соответствует экстремуму функции (3.26), то есть условию  $df(r)/dr|_{r_m} = 0$ , из которого получаем

$$r_m = a_B$$

и

$$f_m(a_B) = 4e^{-2}/a_B \approx 1,1 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}.$$

Пусть при  $r = a_B + \delta r$  плотность вероятности в два раза меньше максимального значения:

$$f(a_B + \delta r) = \frac{4}{a_B^3} (a_B + \delta r)^2 \exp\left[-\frac{2(a_B + \delta r)}{a_B}\right] = \frac{1}{2} f_m(a_B) = \frac{1}{2} \frac{4}{a_B} e^{-2}.$$

Отсюда для определения отношения  $\delta/a_B$  получаем уравнение

$$2\delta/a_B = \ln 2 + 2\ln(1 + \delta/a_B).$$

Предположим, что  $\delta/a_B \ll 1$ . Тогда, раскладывая логарифмическую функцию в степенной ряд до второго члена, получаем оценку

$$\delta \approx a_B \sqrt{\ln 2} \approx 0,8 a_B \text{ и } \Delta = 2\delta \approx 1,6 a_B,$$

из которой следует, что наше предположение не верное. Поэтому определим ширину  $\Delta$  боровской орбиты из графика функции

$$f(r) = |\Psi(r)|^2 4\pi r^2 = \frac{4}{a_B^3} r^2 \exp[-2r/a_B] \quad (\text{см. рис. 3.2}).$$

Получаем, что ширина сферического слоя, в котором плотность вероятности

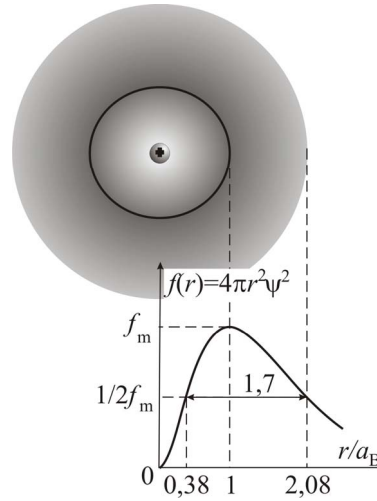


Рис. 3.2. Распределение электронной плотности в атоме водорода. Плотность вероятности обнаружения электрона  $f(r)$  в зависимости от его удаления  $r$  от центра ядра. Максимум плотности вероятности находится на расстоянии, равном боровскому радиусу  $a_B$ .

нахождения электрона больше половины от максимального значения, соответствующего радиусу боровской орбиты, равна

$$\Delta = 0,62a_B + 1,08a_B = 1,70a_B \approx 0,85\text{\AA}.$$

Следовательно, боровская орбита является достаточно широкой, больше  $a_B$ :  $\Delta/a_B \approx 1,7$ .

**Ответ.**  $f_m(a_B) = 4e^{-2}/a_B \approx 1,1 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$ ,  $\Delta = 1,7a_B \approx 0,85\text{\AA}$ .

**Задача 3.3. (Кинетическая энергия электрона в атоме водорода.)** Используя функцию распределения электронной плотности (3.26) в основном состоянии атома водорода найдите среднее значение кинетической энергии электрона и сравните со значением  $E_{k1}$  (3.8), рассчитанным в рамках полуклассической модели атома (в задаче 3.1).

**Решение.** Среднее значение функции  $\varphi(r)$  вычисляется по формуле для средних значений при известной вероятности  $\Psi^*(r)\Psi(r)$  с которой электрон находится на удалении  $\mathbf{r}$  от ядра:

$$\langle \varphi \rangle = \int_0^\infty \Psi^* \varphi(r) \Psi d\tau_r. \quad (3.27)$$

Кинетическая энергия электрона  $mv^2(r)/2$  зависит от радиуса орбиты  $r$ . Связь  $v(r)$  можно получить из системы уравнений (см. формулы (3.7) и (3.8)), исключая из выражений  $n$ :

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = E_{k1} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n^2 = r/a_B$$

и

$$\frac{mv^2}{2} = E_{k1} \cdot \frac{1}{n^2} = E_{k1} \cdot \frac{a_B}{r}. \quad (3.28)$$

Подставляя в (3.27) кинетическую энергию (3.28) и волновую функцию (3.25), находим

$$\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = \int_0^\infty E_{k1} \frac{a_B}{r} \frac{4r^2}{a_B^3} \exp\left[\frac{-2r}{a_B}\right] dr = E_{k1} \frac{4}{a_B^2} \int_0^\infty r \exp\left[\frac{-2r}{a_B}\right] dr = E_{k1} \quad (3.29)$$

Таким образом, среднее значение кинетической энергии в основном состоянии равно значению кинетической энергии, рассчитанной по модели Бора.

**Ответ:**  $\left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle = E_{k1} = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2}.$

### §3.2. Многоэлектронные атомы

Простейшим многоэлектронным атомом является атом гелия, в котором два электрона.

В ионе гелия  $\text{He}^+$  один электрон. Поэтому для него можно использовать формулы для водородоподобных атомов при  $Z=2$  (так как заряд ядра  $+2e$ ).

Энергия связи электрона в ионе  $\text{He}^+$

$$E_{\text{He}^+} = Z^2 E_{\text{H}} = 4 \cdot (-13,56) = -54,27 \text{ эВ}.$$

Радиус первой орбиты электрона (радиус иона гелия)

$$r_1 = \frac{a_{\text{B}}}{Z} n^2 = \frac{a_{\text{B}}}{2} = 0,25 \text{ \AA}.$$

При добавлении к  $\text{He}^+$  еще одного электрона следует учесть дополнительно энергию притяжения второго электрона к ядру и энергию отталкивания электронов. Весь спектр разрешенных значений энергии (энергетический спектр) смещается, изменяется также энергия связи первого электрона с ядром. Энергия основного состояния по модулю (первый потенциал ионизации) у атома гелия выше, чем у иона (см. рис. 3.3):

$$E_{1s} = -24,59 \text{ эВ},$$

а радиус атома гелия  $r_{1s} = 0,122 \text{ нм}$  — радиус орбиты в основном состоянии больше, чем у иона.

Это значит, что энергия  $1s$ -

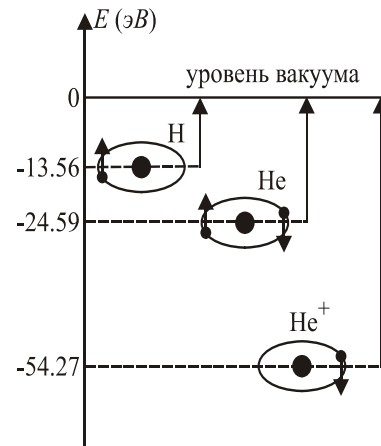


Рис. 3.3. Первый потенциал ионизации в атомах H, He и ионе  $\text{He}^+$ .

состояния, заполненного двумя электронами у атома He, равная  $-24,59$  эВ, существенно меньше энергии связи  $54,27$  эВ одного электрона в ионе  $\text{He}^+$ . Следовательно, энергия кулоновского отталкивания более чем в два раза уменьшает энергию связи с ядром одного электрона в ионе  $\text{He}^+$ .

Таким образом, как увеличение заряда ядра ( $\text{H} \rightarrow \text{He}^+$ ), так и рост числа электронов в атоме ( $\text{He}^+ \rightarrow \text{He}$ ) приводят к изменению энергетического спектра атомов (изменению положения электронных уровней по шкале энергии).

Необходимость учета взаимодействия электронов делает практически невозможным точный расчет волновых функций и энергетических состояний электронов в многоэлектронных атомах.

Однако для щелочных металлов и ионов, имеющих на внешней оболочке один электрон, можно использовать модель водорода. Чем дальше орбита от атомного остова (чем больше  $n$ ), тем больше она подобна орбите атома водорода. Такие атомы и ионы будем называть водородоподобными.

### §3.3. Спектральные линии атомов

Состояния (уровни) атома водорода с  $n > 1$  называются возбужденными. Рассмотрим переходы электрона с энергетического уровня, имеющего главное квантовое число  $n_1$ , на уровень с главным квантовым числом  $n_2$ .

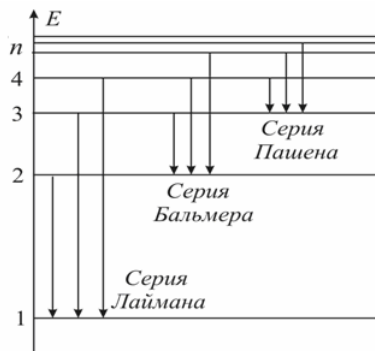


Рис.3.4. Серии Лаймана, Бальмера и Пашена (без соблюдения масштаба).

При переходе, например, с уровня  $n_1 = 2$  на уровень  $n_2 = 1$  атом водорода излучает фотон с энергией

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{21} &= E_1 - E_2 = \\ &= E_1 \left(1 - 1/2^2\right) \approx 10,2 \text{ эВ} \quad (3.30) \end{aligned}$$

и длиной волны

$$\lambda_{21} = \frac{2\pi\hbar c}{\hbar\omega} \approx 121,6 \text{ нм}. \quad (3.31)$$

Все спектральные линии излучения для водородоподобных атомов и ионов разделяются

на серии. Серии классифицируются по главному квантовому числу  $n_0$  энергетического уровня, на который происходит переход с возбужденных уровней энергии с квантовыми числами  $n_i > n_0$ . Называется серия по фамилии автора, впервые открывшего данную серию излучения (см. табл. 3.1 и рис. 3.4). Серии Т. Лаймана и И. Я. Бальмера наблюдаются в спектрах большинства космических объектов.

Таблица 3.1.

**Серии спектральных линий излучения для водородоподобных атомов и ионов**

| Серия    | $n_0$ | $n_i$      |
|----------|-------|------------|
| Лаймана  | 1     | 2,3,4, ... |
| Бальмера | 2     | 3,4,5, ... |
| Пашена   | 3     | 4,5,6, ... |
| и другие |       |            |

В табл. 3.2 приведены значения ряда констант, необходимых для последующих вычислений.

Таблица 3.2

**Значения некоторых констант**

|                     |                                                                                                                                      |
|---------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Постоянная Планка   | $h = 2\pi\hbar = 6,62559 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} ,$<br>$\hbar = 1,05449 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} .$ |
| Скорость света      | $c = 2,997925 \cdot 10^8 \text{ м/с}$                                                                                                |
| Заряд электрона     | $e = 1,60210 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$                                                                                              |
| Масса электрона     | $m = 9,10908 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$                                                                                              |
| Ридберг             | $Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} = 13,6056981 \text{ эВ} ,$                                                             |
| Постоянная Ридберга | $R_\infty = \frac{Ry}{2\pi\hbar c} = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c(4\pi\epsilon_0)^2} = 1,097373 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} .$            |

Водородоподобный ион с зарядом ядра  $(+Ze)$  при переходе с  $n_1$  уровня на  $n_0$ -уровень ( $n_0$ -серия) излучает фотон, который имеет

$$\text{частоту} \quad \omega_{n_0 n_1} = \frac{E_{n_1} - E_{n_0}}{\hbar} = \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ry} \left[ \frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n_1^2} \right]; \quad (3.32)$$

$$\text{волновой вектор} \quad k_{n_0 n_1} = \frac{\omega_{n_0 n_1}}{c} = 2\pi R_\infty Z^2 \left[ \frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n_1^2} \right]; \quad (3.33)$$

$$\text{обратную длину волны} \quad \lambda_{n_0 n_1}^{-1} = \frac{k_{n_0 n_1}}{2\pi} = R_\infty Z^2 \left[ \frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n_1^2} \right]. \quad (3.34)$$

Найдем разность волновых векторов и частот фотонов, излучаемых при переходе с уровней  $n_1$  и  $n_2$  на  $n_0$ -уровень, т. е. для спектральных линий одной  $n_0$ -серии:

$$k_{n_0 n_1} - k_{n_0 n_2} = 2\pi R_\infty Z^2 \left[ \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right] = k_{n_2 n_1}, \quad (3.35)$$

$$\omega_{n_0 n_1} - \omega_{n_0 n_2} = \frac{1}{\hbar} \text{Ry} Z^2 \left[ \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right] = \frac{E_{n_2 n_1}}{\hbar} = \omega_{n_2 n_1}.$$

Из (3.35) следует, что разность векторов  $k_{n_0 n_1} - k_{n_0 n_2}$  серии  $n_0$  соответствует волновому вектору  $k_{n_2 n_1}$  фотона, излучаемого тем же атомом, при переходе с уровня  $n_1$  на уровень  $n_2$  (из серии  $n_2$ ).

Итак, **спектры излучения и поглощения** определяются расположением энергетических уровней атома.

**Задача 3.4. (Спектр атома лития.)** Линии с длинами волн  $\lambda_1 = 640,4$  нм,  $\lambda_2 = 460,3$  нм,  $\lambda_3 = 413,3$  нм в спектре атома лития принадлежат одной спектральной серии. На основании этих данных рассчитайте, какие еще длины волн имеются в спектре атома лития? Используйте водородоподобную модель.

**Решение.** Спектр щелочных металлов, к которым относится литий, связан с переходом валентного электрона с орбиты на орбиту. Валентный электрон движется в поле **атомного остова**: поле положительно заряженного ядра и поле, создаваемое остальными электронами. Чем дальше валентный электрон от ядра (больше

квантовое число  $n$ ), тем больше поле атомного остова похоже на поле точечного заряда, как у атома водорода.

Поскольку даны линии одной серии, то переходы происходят на один уровень. Пусть для этого уровня квантовое число равно  $n_0$ . Пусть переход  $n_1 \rightarrow n_0$  соответствует  $\lambda_{01} = \lambda_1$  – максимальной из заданных длин волн;  $n_2 \rightarrow n_0$  соответствует длине волны  $\lambda_{02} = \lambda_2$ ;  $n_3 \rightarrow n_0$  соответствует минимальной длине волны  $\lambda_{03} = \lambda_3$ . Тогда  $n_0 < n_1 < n_2 < n_3$ . Кроме описанных в задаче переходов с участием данных уровней энергии возможны переходы на уровень  $n_1$ :  $n_2 \rightarrow n_1$  с длиной волны  $\lambda_{12}$  и  $n_3 \rightarrow n_1$  с длиной волны  $\lambda_{13}$ , а также переход  $n_3 \rightarrow n_2$  с длиной волны  $\lambda_{23}$ . Переходы  $n_2 \rightarrow n_1$  и  $n_3 \rightarrow n_1$  относятся к одной серии  $n_1$ .

Для определения длин волн  $\lambda_{ij}$  воспользуемся соотношением (3.35), справедливым для водородоподобных атомов. Согласно (3.35), волновые векторы переходов вычисляются по формулам

$$\begin{cases} n_2 \rightarrow n_1 & k_{12} = k_{02} - k_{01}, \\ n_3 \rightarrow n_1 & k_{13} = k_{03} - k_{01}, \\ n_3 \rightarrow n_2 & k_{23} = k_{03} - k_{02}. \end{cases}$$

По волновым векторам  $k_{ij}$  находим искомые длины волн

$$\lambda_{12} = \frac{2\pi}{k_{12}} = \frac{2\pi}{k_{02} - k_{01}} = \frac{1}{1/\lambda_2 - 1/\lambda_1} = 1636,6 \text{ нм},$$

$$\lambda_{13} = \frac{2\pi}{k_{13}} = \frac{2\pi}{k_{03} - k_{01}} = \frac{1}{1/\lambda_3 - 1/\lambda_1} = 1165,5 \text{ нм},$$

$$\lambda_{23} = \frac{2\pi}{k_{23}} = \frac{2\pi}{k_{03} - k_{02}} = \frac{1}{1/\lambda_3 - 1/\lambda_2} = 4047,7 \text{ нм}.$$

Экспериментально полученные длины волн  $\lambda_{12} = 1869,7 \text{ нм}$ ,  $\lambda_{13} = 1278,2 \text{ нм}$  и  $\lambda_{23} = 4047,5 \text{ нм}$  лежат близко к значениям, рассчитанным в задаче по водородоподобной модели. Причем, чем дальше переходы от атомного остова (чем больше  $n$ ), тем лучшее согласие с водородной моделью.

**Ответ.**  $\lambda_{12} = (1/\lambda_2 - 1/\lambda_1)^{-1} = 1636,6 \text{ нм},$

$\lambda_{13} = (1/\lambda_3 - 1/\lambda_1)^{-1} = 1165,5 \text{ нм}, \lambda_{23} = (1/\lambda_3 - 1/\lambda_2)^{-1} = 4047,7 \text{ нм}.$

**Задача 3.5. (Серия Лаймана.)** Длина волны одной из линий серии Лаймана у атома водорода равна  $\lambda = 94,97$  нм. Определите квантовые числа энергетических уровней, переход между которыми соответствует данной  $\lambda$ . Какую энергию (в эВ) имеют излучаемые фотоны?

**Решение:** По длине волны фотонов определяем их частоту и энергию

$$\begin{aligned}\hbar\omega = \hbar ck = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} &= \frac{2\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{94,97 \cdot 10^{-9}} = 0,2084 \cdot 10^{-17} \text{ Дж} = \\ &= \frac{0,2084 \cdot 10^{-17}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 13,02 \text{ эВ}.\end{aligned}$$

Серия Лаймана соответствует переходу на уровень с квантовым числом  $n_0 = 1$ . По известной длине волны фотона  $\lambda_{1n}^{-1} = R_\infty \left[ 1 - 1/n^2 \right]$  (формула (3.34) для водорода при  $n_0 = 1$  и  $Z = 1$ ) находим квантовое число возбужденного состояния:

$$n = \left[ 1 - \frac{1}{R_\infty \lambda_{1n}} \right]^{-1/2} = \left[ 1 - \frac{1}{1,097 \cdot 10^7 \cdot 94,97 \cdot 10^{-9}} \right]^{-1/2} = 5.$$

Следовательно, пятый энергетический уровень водорода на 13,03 эВ выше основного уровня с  $n = 1$  и имеет энергию

$$E_5 = E_1 + \hbar\omega = -13,56 + 13,02 = -0,54 \text{ эВ}.$$

**Ответ:** Переход с уровня  $n = \left[ 1 - 1/(R_\infty \lambda_{1n}) \right]^{-1/2} = 5$  на уровень  $n_0 = 1$ ;  $\hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = 13,02 \text{ эВ}$ .

**Задача 3.6.** Интервал частот, занимаемый одной из серий в спектре излучения ионов  $\text{He}^+$  (см. §3.2), равен  $\Delta\omega = 5,16 \cdot 10^{15}$  рад/с. Определите длину волны головной линии серии.

**Головной линией**  $n_0$ -серии называется линия, соответствующая минимальной частоте фотона, то есть переходу с уровня  $(n_0 + 1)$  на  $n_0$ -уровень.

**Решение.** Интервал частот между крайними линиями — интервал между линией с максимальной и минимальной частотами.



Максимальной частоте соответствует переход с максимально возможного уровня возбуждения: в пределе с  $n \rightarrow \infty$  на  $n_0$ .

Ион гелия содержит один электрон и его спектр подобен спектру атома водорода. Используя формулу (3.32) для водородоподобных атомов, определяем спектральную ширину  $n_0$ -серии для иона гелия ( $Z = 2$ ):

$$\begin{aligned}\Delta\omega &= \omega_{\max} - \omega_{\min} = \omega_{n_0\infty} - \omega_{n_0(n_0+1)} = \\ &= \frac{1}{\hbar} \text{Ry} Z^2 \left( \left[ \frac{1}{n_0^2} \right] - \left[ \frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{(n_0+1)^2} \right] \right) = \frac{4 \text{Ry}}{\hbar} \frac{1}{(n_0+1)^2} .\end{aligned}\quad (3.36)$$

Из (3.36) находим

$$n_0 = 2 \sqrt{\frac{\text{Ry}}{\hbar \Delta\omega}} - 1 = 2 \sqrt{\frac{13,6053 \cdot 1,6021 \cdot 10^{-19}}{1,05449 \cdot 10^{-34} \cdot 5,16 \cdot 10^{15}}} - 1 = 3 .$$

Таким образом, наблюдается спектральная серия Пашена ( $n_0 = 3$ , см. рис. 3.4).

По формуле (3.34) определяем длину волны головной линии серии Пашена ( $n_2 = 3$ ) для иона гелия:

$$\begin{aligned}\lambda_{n_0(n_0+1)}^{-1} &= 4R_\infty \left[ \frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{(n_0+1)^2} \right] = 4R_\infty \left[ \frac{1}{9} - \frac{1}{16} \right] = \frac{7}{9 \cdot 16} R_\infty , \\ \lambda_{n_0(n_0+1)} &= \frac{9 \cdot 16}{7 R_\infty} = \frac{9 \cdot 16}{7 \cdot 1,09737 \cdot 10^7} \approx 1,875 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 187,5 \text{ нм} .\end{aligned}$$

$$\textbf{Ответ:} \quad \lambda_{n_0(n_0+1)} = \frac{1}{4R_\infty} \left[ \frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{(n_0+1)^2} \right]^{-1} = 187,5 \text{ нм} , \quad \text{где}$$

$$n_0 = 2 \sqrt{\frac{\text{Ry}}{\hbar \Delta\omega}} - 1 = 3 .$$

**Задача 3.7. (Серия Бальмера.)** Какие линии в спектре Бальмера атомарного водорода лежат в диапазоне длин волн от  $\lambda_1 = 400$  нм до  $\lambda_2 = 500$  нм.

**Решение.** Спектр Бальмера соответствует переходам электрона с возбужденного  $n$  уровня на уровень  $n_0 = 2$ . Длины волн излучае-

рых фотонов  $\lambda_{2n}^{-1} = R_{\infty} \left[ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right]$  (3.34), и таким образом,

$$n = \left[ \frac{1}{4 - R_{\infty} \lambda_{2n}} \right]^{-1/2}.$$

Границам заданного в условии задачи диапазона длин волн соответствуют значения  $n$ :

$$\lambda_1 = 400 \text{ нм}, \quad n_1 = 6,7;$$

$$\lambda_2 = 500 \text{ нм}, \quad n_2 = 3,8.$$

Внутри диапазона  $n_2 = 3,8 < n < n_1 = 6,7$  лежат квантовые номера  $n = 4, 5, 6$ , которым соответствуют три линии с длинами волн (3.34):

$$\lambda_{24} = \left( R_{\infty} \left[ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2} \right] \right)^{-1} \approx 486,0 \text{ нм},$$

$$\lambda_{25} = \left( R_{\infty} \left[ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2} \right] \right)^{-1} \approx 433,9 \text{ нм},$$

$$\lambda_{26} = \left( R_{\infty} \left[ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{6^2} \right] \right)^{-1} \approx 410,1 \text{ нм}.$$

**Ответ.**  $\lambda_{24} = 486,0 \text{ нм}$ ,  $\lambda_{25} = 433,9 \text{ нм}$ ,  $\lambda_{26} = 410,1 \text{ нм}$ .

**Задача 3.8. (Фотоионизация.)** Под действием электромагнитного излучения (см. рис. 3.5) с длиной волны  $\lambda = 20,0 \text{ нм}$  невозбужденные ионы  $\text{He}^+$  испускают электроны (фотоэлектроны) и ионизуются. Какую скорость имеют испускаемые фотоэлектроны?

**Решение.** Второй потенциал ионизации атома He равен энергии связи электрона с ядром иона  $\text{He}^+$ . По формуле (3.10) при  $n = 1$  и  $Z = 2$ :

$$I_{2i} = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = R_{\infty} Z^2 = 4R_{\infty}. \quad (3.37)$$

Энергия фотонов расходуется на ионизацию иона гелия  $\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^{++}$  и сообщение вырываемому электрону кинетической энергии  $mv^2/2$ . Таким образом, скорость фотоэлектронов определяется из уравнения Эйнштейна (1.18)

$$\frac{mv^2}{2} = E_{\phi} - I_{2i}, \quad (3.38)$$

где энергия фотона  $E_{\phi} = \hbar\omega = 2\pi\hbar c / \lambda$ .

Учитывая (3.37), из (3.38) находим

$$\begin{aligned} v &= \sqrt{2(E_{\phi} - I_{2i})/m} = \sqrt{\frac{4}{m\lambda}(\pi\hbar c - 2Ry\lambda)} = \\ &= \sqrt{\frac{4(\pi \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8 - 2 \cdot 13,6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 20 \cdot 10^{-9})}{0,9 \cdot 10^{-30} \cdot 20 \cdot 10^{-9}}} \approx 3,0 \cdot 10^6 \text{ м/с}. \end{aligned}$$

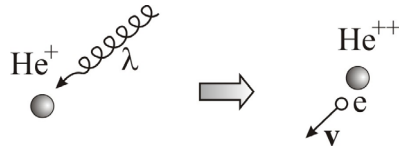


Рис. 3.5. Ион поглощает фотон с энергией, большей чем второй потенциал ионизации атома He. Электрон покидает орбиту иона, и осуществляется переход  $\text{He}^+ \rightarrow \text{He}^{++}$ .

**Ответ.**  $v = \sqrt{\frac{4}{m\lambda}(\pi\hbar c - 2R_{\infty}\lambda)} \approx 3,0 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$

**Задача 3.9. (Серия Лаймана в спектре движущихся атомов водорода.)** Излучающие атомы водорода движутся вдоль оси  $OX$ . Неподвижный приемник расположен на большом расстоянии от излучающих атомов, под углом  $\theta = 60^\circ$  к оси  $OX$ . Приемник регистрирует излучение с длиной волны головной линии серии Лаймана, которая оказывается смещенной на  $\Delta\lambda = 0,15 \text{ нм}$  по сравнению с длиной волны, излучаемой неподвижными атомами водорода. Найти скорость движения атомов водорода.

**Решение.** Пусть при  $t = 0$  излучается пик 1 волны (рис. 3.6 а), который со скоростью  $c$  перемещается вдоль положительного направления оси  $OX$  (по направлению скорости движения атома водорода). Через период  $T$  излучается второй пик, а первый перемещается к этому моменту времени на расстояние  $cT = \lambda$ . Расстояние между пиками соответствует длине волны  $\lambda'$ , принимаемой приемником, находящимся на оси  $OX$  при  $x > 0$ :  $\lambda' = \lambda - vT$ , где  $v$  — скорость движения атома водорода.

Если приемник расположен под углом  $\theta$  к оси  $OX$  (рис. 3.6 б), то через период первый пик так же проходит расстояние  $cT$

(рис. 3.6 б), а расстояние между пиками, соответствующее длине волны  $\lambda''$ , воспринимаемой приемником, равно

$$\lambda'' = \lambda - vT \cdot \cos \theta. \quad (3.39)$$

Головная линия серии Лаймана соответствует переходу со второго уровня  $n = 2$  на первый  $n = 1$ . Согласно (3.34) длина волны головной линии равна

$$\lambda_{12} = R_{\infty}^{-1} \left[ 1 - \frac{1}{2^2} \right]^{-1} = \frac{4}{3R_{\infty}}. \quad (3.40)$$

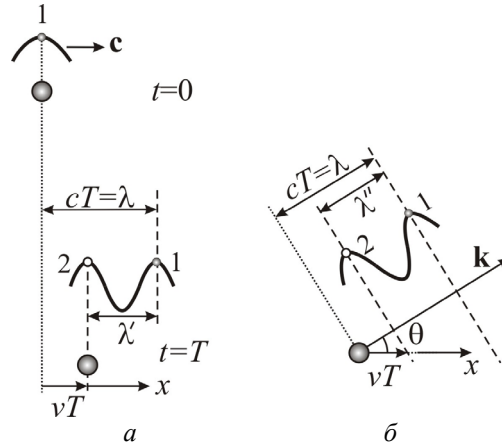


Рис. 3.6. Иллюстрация изменения длины волны при движении источника (а) по оси  $OX$  (по направлению к приемнику) и (б) под углом  $\theta$  к оси  $OX$ .

Заменяя в (3.39)  $\lambda - \lambda'' = \Delta\lambda$  и  $T = \frac{\lambda_{12}}{c} = \frac{4}{3cR_{\infty}}$ , находим скорость движения атомов

$$v = \frac{\Delta\lambda}{T \cos \theta} = \frac{3cR_{\infty}}{4 \cos \theta} \Delta\lambda \approx 7,4 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

**Ответ:**  $v = \frac{3cR_{\infty}}{4 \cos \theta} \Delta\lambda \approx 7,4 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$

### §3.4. Энергетический спектр колебательного и вращательного движения молекул

В образовании молекул из атомов основную роль играют электрические взаимодействия между электронами атомов, образующих химическую связь.

**Химическая связь** — это взаимодействие атомов, обуславливающее устойчивость молекулы, или в целом вещества в конденсированном состоянии. Современная теория определяет химическую связь как *коллективное взаимодействие* ядер и электронов, обеспечивающее существование хотя бы одного связанного состояния системы.

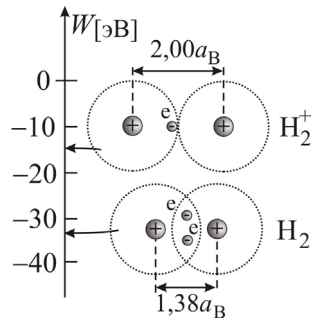
Химические связи, образующиеся при перекрытии волновых функций, можно разделить на три основных типа: *металлическая, ковалентная и ионная связи*. В действительности возможны и реализуются промежуточные типы связи.

При сближении двух атомов (с энергиями  $E_a$ ,  $E_b$  и атомными радиусами  $r_a$ ,  $r_b$ ) на расстояние порядка суммы атомных радиусов  $R_{ab} \sim r_a + r_b$  начинается перекрытие волновых функций валентных (периферийных) электронов.

Когда электроны находятся между ядрами соседних атомов, двигаясь в поле обоих атомов, они обобществляются. Движение обобществленных электронов описывается новой обобщенной волновой функцией — **молекулярной волновой функцией (молекулярной орбиталью)**. Обобществление валентных электронов ведет к перераспределению электронной плотности и изменению энергии системы:  $E \neq E_a + E_b$ . Если  $E < E_a + E_b$ , то между атомами возникают силы притяжения. Эти силы притяжения называются **силами химической связи** (химического сродства), силами сцепления. *Радиус действия* сил химической связи, в первом приближении, равен сумме радиусов свободных атомов и составляет величину от  $\sim 1 \text{ \AA}$  до  $3 \text{ \AA}$ . При дальнейшем сближении атомов быстро растут силы отталкивания между ядрами. Равновесному состоянию соответствует состояние с минимумом энергии  $E_{min}$ , когда силы притяжения и отталкивания уравниваются друг друга. За **энергию химической связи** (энергию сцепления) принимается разность  $(E_a + E_b) - E_{min}$ . По своим свойствам образовавшаяся молекула качественно отличается от составляющих ее элементов.

В качестве примера приведем некоторые данные для молекулы водорода  $\text{H}_2$  и иона  $\text{H}_2^+$ , которые оба содержат два протона

(рис. 3.7). Добавление электрона и переход от  $\text{H}_2^+$  к  $\text{H}_2$  энергетически выгоден, энергия связи электронов с ядрами увеличивается, расстояние между ядрами атомов Н уменьшается:



$$r(\text{H}_2^+) = 2,00 a_B, \quad r(\text{H}_2) = 1,38 a_B.$$

Положение энергетических уровней зависит от межатомного расстояния  $R$  (между ядрами атомов). Энергия одного электрона на молекулярной орбите

$$E_1(\text{H}_2^+) = -16,0 \text{ эВ},$$

$$E_1(\text{H}_2) = -34,0 \text{ эВ}.$$

Рис. 3.7. Изменение межатомного расстояния и энергетического состояния электрона в молекуле  $\text{H}_2$  по сравнению с ионом  $\text{H}_2^+$ . Пунктиром обозначены сферы, радиус которых равен боровскому радиусу.

**Задача 3.10. (Спектр вращательного движения.)** Определите энергетический спектр **вращательного движения** двухатомной молекулы угарного газа  $\text{CO}$ , пренебрегая изменением межатомного расстояния  $R = 0,113 \text{ нм}$ . Используйте **условие квантования механического момента импульса** (см. приложение 3.1)

$$M_\ell = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}, \quad (3.41)$$

где  $\ell$  — орбитальное квантовое число.

Оцените средний уровень возбуждения при комнатной температуре  $\langle \ell \rangle$  — уровень, на котором находится максимальное число молекул. Оцените порядок длин волн фотонов, излучаемых при переходе с первого уровня возбуждения ( $\ell = 1$ ) в невозбужденное состояние ( $\ell = 0$ ).

**Решение.** Пусть индекс 1 относится к атому С в молекуле  $\text{CO}$ , а 2 — к атому О. В системе центра масс

$$m_1 r_1 - m_2 r_2 = 0,$$

$$r_1 + r_2 = R,$$

где  $r_i$  — расстояние от атома до центра масс. Уравнения вращательного движения атомов относительно центра масс:  $m_1 \omega^2 r_1 = F$  и

$m_2\omega^2 r_2 = F$  (см. рис. 3.8). Умножая первое уравнение на  $m_2$ , а второе — на  $m_1$ , а затем складывая получившиеся выражения, приходим к уравнению вращательного движения

$$\mu\omega^2 R = F$$

материальной точки с массой, равной приведенной массе

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (3.42)$$

вращающейся с той же угловой скоростью  $\omega$  по окружности с радиусом  $R$  (рис. 3.8).

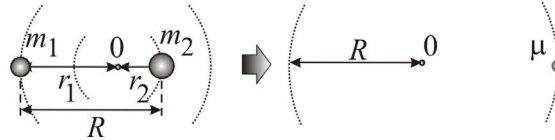


Рис. 3.8. Рисунок, поясняющий эквивалентность задачи о вращательном движении двухатомной молекулы относительно центра масс и задачи о вращательном движении материальной точки с массой, равной приведенной массе молекулы.

Момент инерции системы

$$J_i = \mu R^2, \quad (3.43)$$

момент импульса

$$M_p = J_i \omega = \mu \omega R^2. \quad (3.44)$$

Условие квантования вращательного движения  $M_p = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)}$  (3.41) совместно с (3.44) определяет дискретные значения частот вращения

$$\omega_\ell = \frac{\hbar}{\mu R^2} \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad (3.45)$$

и дискретные значения кинетической энергии вращательного движения (рис. 3.9)

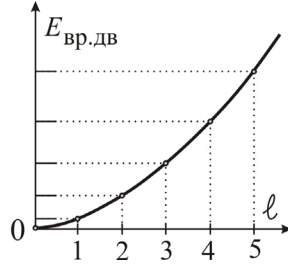
$$E_\ell = \frac{1}{2} J_i \omega_\ell^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \ell(\ell+1). \quad (3.46)$$

Следовательно, дискретный спектр энергетических уровней вращательного движения молекулы (3.46) не является эквиди-

стантным: с ростом энергии (и квантового числа  $\ell$ ) расстояние между уровнями возрастает (см. рис. 3.9).

При переходе с верхнего уровня возбуждения на соседний нижний излучается фотон с частотой

$$\omega_{(\ell+1) \rightarrow \ell} = \frac{E_{\ell+1} - E_{\ell}}{\hbar} = \frac{\hbar}{\mu R^2} (\ell + 1). \quad (3.47)$$



Частота и энергия фотона, излучаемого при переходе с первого уровня возбуждения ( $\ell = 1$ ) в невозбужденное состояние ( $\ell = 0$ ):

$$\omega_{10} = \frac{\hbar}{\mu R^2}, \quad \hbar \omega_{10} = \frac{\hbar^2}{\mu R^2},$$

Рис. 3.9. Зависимость энергии  $E_{\text{вр.дв}}$  вращательного движения двухатомной молекулы от орбитального квантового числа  $\ell$ .

а длина волны фотона

$$\lambda_{10} = \frac{2\pi c}{\omega_{10}} = \frac{2\pi c \mu R^2}{\hbar}.$$

При переходе из возбужденного состояния с  $\ell > 0$  в невозбужденное состояние с  $\ell = 0$  частота и энергия

излучаемого фотона равны:

$$\omega_{\ell 0} = \frac{\hbar}{2\mu R^2} \ell(\ell + 1), \quad \hbar \omega_{\ell 0} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \ell(\ell + 1).$$

Разность частот между соседними линиями в спектре

$$\omega_{(\ell+1)0} - \omega_{\ell 0} = \frac{\hbar}{\mu R^2} (\ell + 1).$$

Следовательно, линии в спектре излучения расположены по частотам не на равном расстоянии друг от друга.

Для определения среднего уровня  $\langle \ell \rangle$  и энергии  $E_{\langle \ell \rangle}$  возбуждения при температуре  $T$  воспользуемся **теоремой о равномерном распределении энергии по степеням свободы**: на одну вращательную степень свободы в среднем приходится энергия  $\langle E \rangle = k_B T / 2$ .

Подставляя  $\langle E_{\ell} \rangle = k_B T / 2$  в (3.46), получаем квадратное уравнение для вычисления среднего уровня возбуждения вращательного движения при температуре  $T$ :



$$\langle \ell \rangle^2 + \langle \ell \rangle - \frac{\mu R^2 k_B T}{\hbar^2} = 0. \quad (3.48)$$

Решение уравнения (3.48):

$$\langle \ell \rangle = \sqrt{\frac{\mu R^2 k_B T}{\hbar^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}.$$

Для молекулы угарного газа  $\mu = \frac{12 \cdot 16 \cdot 10^{-3}}{(12+16)N_A} = 1,14 \cdot 10^{-26}$  кг и

при  $T = 300$  К средний уровень возбуждения

$$\begin{aligned} \langle \ell \rangle &= \sqrt{\frac{\mu R^2 k_B T}{\hbar^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} = \\ &= \sqrt{\frac{1,14 \cdot 10^{-26} (0,113 \cdot 10^{-9})^2 1,38 \cdot 10^{-23} 300}{10^{-68}} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} = 7, \end{aligned}$$

и энергия возбуждения, соответствующая данному уровню,

$$\begin{aligned} E_{\langle \ell \rangle} &= \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \langle \ell \rangle (\langle \ell \rangle + 1) = \frac{10^{-68}}{2 \cdot 1,14 \cdot 10^{-26} (0,113 \cdot 10^{-9})^2} \cdot 7 \cdot 8 = \\ &= 1,9 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} = 1,2 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}. \end{aligned}$$

Частота и длина волны фотона, соответствующего головной линии вращательного спектра молекулы CO:

$$\omega_{10} = \frac{\hbar}{\mu R^2} = \frac{10^{-34}}{1,14 \cdot 10^{-26} (0,113 \cdot 10^{-9})^2} \approx 6,9 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1},$$

$$\lambda_{10} = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{2\pi c \mu R^2}{\hbar} \approx \frac{2\pi \cdot 3 \cdot 10^8}{6,9 \cdot 10^{11}} \approx 2,7 \text{ мм}.$$

Это низкочастотные (длинноволновые) фотоны по сравнению с фотонами, например, головной линии серии Лаймана у атома водорода

$$\omega_{21} = \frac{3R_\infty}{4\hbar} \approx \frac{3 \cdot 13,6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{4 \cdot 10^{-34}} \approx 1,6 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1},$$

$$\lambda_{21} = \frac{2\pi c}{\omega} \approx 118 \text{ нм}.$$

**Ответ.**  $E_\ell = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \ell(\ell+1), \quad \langle \ell \rangle = \sqrt{\frac{\mu R^2 k_B T}{\hbar^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \approx 7,$

$\lambda_{10} = \frac{2\pi c \mu R^2}{\hbar} \approx 2,7 \text{ мм}, \text{ где } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$

**Задача 3.11. (Спектр колебательно движения.)** Между двумя атомами в молекуле действуют упругие силы притяжения (силы химической связи). Коэффициент упругой связи  $\beta$ . Полагая, что масса первого атома  $M$  значительно превосходит массу  $m$  второго атома, определите разрешенные значения колебательной энергии молекулы. Используйте **правило квантования Бора–Зоммерфельда** (3.3)

$$\oint p dq = 2\pi\hbar n, \quad (3.49)$$

где  $p$  и  $q$  — обобщенные импульс и координата. В частности, для движения вдоль оси  $OX$  правило можно записать в виде

$$\oint p_x dx = 2\pi\hbar n.$$

Заметим, что для движения электрона в атоме Бора правило (3.49) совпадает с условием квантования Бора: на длине стационарной траектории укладывается целое число длин волн.

**Решение.** По условию задачи  $M \gg m$ , поэтому можно считать, что первый атом неподвижный, а второй совершает колебательное движение. Пусть  $x_0$  — расстояние между атомами в состоянии равновесия.

Уравнение движения для второго атома вдоль оси  $OX$  (вдоль оси молекулы):

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\beta(x - x_0) \quad (3.50)$$

имеет известное решение:

$$x(t) = x_0 + A \cos(\omega t + \varphi_0), \quad (3.51)$$

где  $\omega = \sqrt{\beta/m}$  — частота свободных гармонических колебаний,  $A$  — амплитуда,  $\varphi_0$  — начальная фаза колебаний.

Скорость второго атома

$$v_x(t) = -A\omega \sin(\omega t + \varphi_0). \quad (3.52)$$

Вычислим левую часть уравнения (3.49)

$$\oint p_x dx = \oint m v_x dx = m \oint v_x^2 dt = m(A\omega)^2 \int_0^T \sin^2(\omega t + \varphi_0) dt = \\ = m(A\omega)^2 \frac{T}{2} = mA^2\omega\pi.$$

По правилу квантования (3.49)

$$mA^2\omega\pi = 2\pi\hbar n. \quad (3.53)$$

Энергия колебательного движения молекулы  $E$  складывается из кинетической энергии второго атома (первый считается неподвижным) и потенциальной энергии взаимодействия атомов и, с учетом (3.51) и (3.52) имеем

$$E = \frac{mv_x^2}{2} + \frac{\beta(x-x_0)^2}{2} = \frac{mA^2\omega^2}{2} \sin^2(\omega t + \varphi_0) + \frac{\beta A^2}{2} \cos^2(\omega t + \varphi_0) = \\ = \frac{mA^2\omega^2}{2},$$

где учтено, что  $\omega = \sqrt{\beta/m}$ .

Используя (3.53), получаем дискретный ряд разрешенных колебательных уровней энергии:

$$E_n = \frac{mA^2\omega^2}{2} = n\hbar\omega.$$

#### Замечания.

1. Если учесть энергию нулевых колебаний (см. задачу 2.6), то энергетический спектр колебаний на частоте  $\omega$  можно записать в виде

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \quad (3.54)$$

Хотя соотношение (3.54) получено при условии ряда упрощающих предположений, оно является точным и, описывая спектр **квантового осциллятора**, имеет важное значение в физике.

2. Если приближение  $M \gg m$  не выполняется, то можно начало координат совместить с центром масс и рассматривать приведенную массу  $\mu = Mm/(M + m)$ .

3. В реальной молекуле кроме сил притяжения, ответственных за образование химической связи между атомами, существуют и силы отталкивания, действующие на близких расстояниях (порядка диаметров атомов). В отличие от выбранной в задаче модели (рис. 3.10 а) для реальной молекулы потенциальная энергия взаимодействия имеет несимметричный вид (рис. 3.10 б). Минимум потенциальной энергии соответствует расстоянию  $r_0$  между атомами.

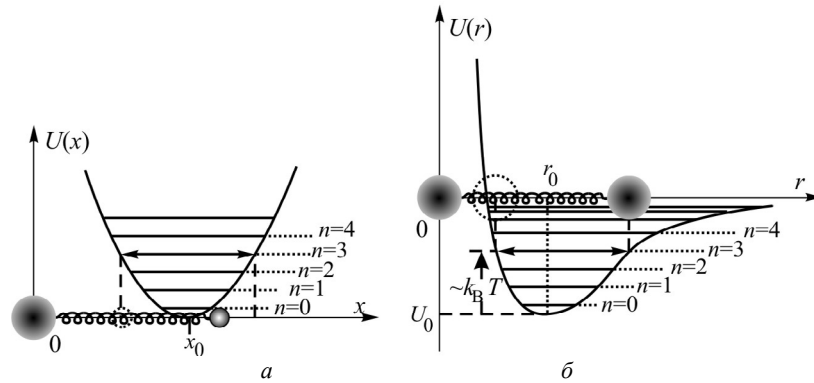


Рис. 3.10. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия атомов  $U(x)$  и  $U(r)$  от расстояния между атомами в двухатомной молекуле;  $x_0$  и  $r_0$  — положения равновесия при  $T = 0$  К: а — схема колебательных уровней для молекулы в приближениях задачи и; б — для реальной молекулы, уровни которой сгущаются с ростом энергии, то есть при удалении от дна потенциальной ямы. Двойной стрелкой показано колебательное движение на третьем энергетическом уровне. При этом равновесное расстояние между атомами в реальной молекуле больше  $r_0$ , а в модели а остается равным  $x_0$ .

При расстояниях между атомами, больших эффективного диаметра  $d$ , преобладают силы притяжения, а при расстояниях  $r < d$  преобладают силы отталкивания.

4. Расстояние между колебательными уровнями энергии обычно больше, чем между вращательными уровнями. Например, для молекулы СО расстояние между нижними вращательными уровнями

ми  $E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2}{\mu R^2} \approx 4,3 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}$  (см. (4.47), задача 4.10), а между

колебательными уровнями

$$\hbar\omega = 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 1,28 \cdot 10^{14} \approx 1,34 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} \approx 8,4 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}.$$

**Ответ.**  $E_n = n\hbar\omega$ , где  $\omega = \sqrt{\beta/m}$ .

### Приложение 3.1. Квантовое состояние электрона в атоме

Пространственное распределение квадрата модуля волновой функции  $|\Psi(r, \theta, \varphi)|^2$  электрона в атоме описывает распределение плотности вероятности нахождения электрона около ядра, т. е. плотности отрицательного заряда в окооядерном пространстве. В такой интерпретации электрон рассматривается как некоторое пространственное образование — **электронное облако** (рис. 3.2).

Кроме главного квантового числа  $n$ , для описания состояния электрона используются квантовые числа  $\ell$  и  $m$ .

Число  $\ell$  называется **орбитальным (азимутальным) квантовым числом**. Оно определяет модуль момента импульса электрона  $|\mathbf{M}_\ell| = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ , может принимать целочисленные значения в пределах  $0 \leq \ell \leq (n-1)$  и характеризует пространственное распределение плотности заряда вокруг ядра. При  $\ell = 0$  угловые части волновых функций имеют постоянные, не зависящие от углов  $\theta$  и  $\varphi$ , значения. Это означает, что в состояниях с  $\ell = 0$  электронная плотность распределена радиально симметрично относительно ядра. При этом орбита не фиксирована в пространстве, момент импульса непрерывно меняет свою ориентацию так, что его среднее во времени значение равно нулю. При  $\ell \neq 0$  распределение электронной плотности фиксировано в координатном пространстве, в результате чего момент импульса имеет отличное от нуля значение.

Каждому энергетическому уровню с  $n > 1$  соответствует несколько разных орбиталей, т. е. различных состояний электрона. Орбитали с различными  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$  обозначаются буквами  $s, p, d, f$ , и т. д. соответственно.

В квантовой механике допускается одновременное задание модуля момента импульса и его проекции на выделенное направление (обычно принимается направление оси  $oz$ ). Проекция момента импульса на это направление квантована  $L_{\ell z} = \hbar m$ , где  $m$  — **магнитное квантовое число**, которое может принимать целочисленные значения в интервале  $-\ell \leq m \leq +\ell$ . Магнитное квантовое число определяет пространственную ориентацию вектора момента импульса и, тем самым, пространственное распределение электронной плотности.

Волновая функция  $\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) \cdot Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ , характеризующаяся квантовыми числами  $n$ ,  $\ell$  и  $m$ , называется **атомной орбиталью**. Если волновая функция учитывает также и направление спина, то есть описывается четырьмя квантовыми числами  $n$ ,  $\ell$ ,  $m$ ,  $s$ , то она называется **спин-орбиталью**. Каждой атомной орбитали соответствуют две спин-орбитали.

**Квантовое состояние электрона** задается набором всех квантовых чисел  $n$ ,  $\ell$ ,  $m$ ,  $s$ , включая и спиновое число  $s$ . Согласно принципу Паули, на одной атомной спин-орбитали может находиться не более одного электрона. Если на атомной орбитали находятся два электрона, то спины их антипараллельны. Такие электроны называются *спаренными*, а **атомная орбиталь**, на которой они находятся, — **заполненной**.

Если на атомной орбитали находится один электрон, то он называется *неспаренным*. Атомная орбиталь называется **незаполненной** или **вакантной**, если на ней нет ни одного электрона.

Совокупность электронов, занимающих орбитали с одним и тем же значением главного квантового числа, называется **электронным слоем**.

В атоме водорода энергия состояний с одним и тем же главным квантовым числом  $n$ , но разными орбитальными квантовыми числами, соответствующими  $s, p, d, f \dots$  состояниям, одинаковая  $E_n$  (рис. 3.1).

### Приложение 3.2. Ридберговские атомы

Заслуживает внимания тот факт, что дискретность спектра наиболее сильно выражена при небольших  $n$ . При больших  $n$  уровни сильно возбужденных состояний расположены достаточно

близко друг к другу. Возбужденный атом с большим квантовым числом  $n$  называется **ридберговским атомом**.

Из (3.7) следует, что размер ридберговского атома при  $n = 1000$  составляет  $\sim 5 \cdot 10^{-2}$  мм (!), то есть атом становится макроскопическим.

Для основного состояния атома ( $n = 1$ ) энергия  $E_1 = 13,6$  эВ, для ридберговского атома с  $n = 1\,000$  —  $E_{1\,000} \sim 10^{-5}$  эВ. Это очень маленькая величина, соответствующая энергии теплового движения  $k_B T$  при  $\sim 0,3$  К.

Расстояние между соседними энергетическими уровнями

$$\Delta E_n = \frac{R_\infty}{n^2} - \frac{R_\infty}{(n+1)^2} \approx \frac{2R_\infty}{n^3} \quad (3.55)$$

при  $n = 1000$  составляет  $\Delta E_{1000} \sim 10^{-8}$  эВ. Этой энергии соответствует частота  $\sim 10^6$  Гц. Таким образом, переходы между энергетическими уровнями происходят при поглощении и излучении квантов энергии *мегагерцового диапазона*.

Период обращения П электрона вокруг ядра в модели Бора

$$P_n = P_1 \cdot n^3$$

в основном состоянии составляет  $P_1 \approx 10^{-16}$  с, при  $n = 1000$  —  $P_{1\,000} \approx 10^{-7}$  с. Оценивая скорость электрона на орбите, получаем:

$$v_n = v_1 \cdot n^{-1},$$

$$v_1 \sim 10^6 \text{ м/с}, \quad v_{1\,000} \sim 10^3 \text{ м/с}.$$

Естественное время жизни электрона в возбужденном состоянии равно

$$\tau_n = \tau_1 \cdot n^3.$$

Здесь  $\tau_1 \sim 10^{-8}$  с — естественное время жизни электрона в атоме водорода в основном состоянии. Для ридберговского атома при  $n = 1000$  оно составляет  $\tau_{1\,000} \sim 10$  с (!). Физической причиной увеличения времени жизни электрона в возбужденном состоянии является уменьшение энергии его связи с ядром.

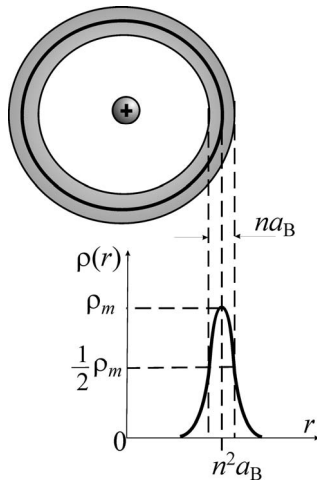


Рис. 3.11. Сферическое распределение плотности  $\rho(r)$   $s$ -электронов в ридберговском атоме,  $n$  — главное квантовое число,  $a_B$  — боровский радиус. Ширина сферического слоя составляет величину порядка  $na_B$ , что соответствует значению электронной плотности на границах слоя равному половине от максимальной величины при  $r = n^2 a_B$ .

При увеличении  $n$  форма электронного облака в  $s$ -состоянии трансформируется. Для орбит с радиусом  $n^2 a_B$  электронная плотность сосредоточена в узком сферическом слое толщиной  $n a_B$ . В основной части внутреннего объема атома электронная плотность пренебрежимо мала. Ридберговский атом напоминает резиновый мяч (рис. 3.11).

### Приложение 3.3. Многофотонные процессы возбуждения

Ранее были рассмотрены такие процессы взаимодействия света с веществом, как фотоэффект — процесс выхода электрона с поверхности металла, фотовозбуждение атома (или молекулы) — переход атома (или молекулы) в возбужденное состояние, а также процессы, сопровождающиеся излучением фотонов при переходе из возбужденного состояния в основное. В каждом акте таких процессов участвовал один фотон — это так называемые однофотонные процессы. Однако квантовая механика не запрещает и многофотонные процессы, наблюдение которых стало возможно после начала использования интенсивного лазерного излучения.

Например, для внешнего фотоэффекта существует красная граница, определяющая минимальную частоту фотона  $\omega_A$  при которой наблюдается эффект:  $\hbar\omega_A = \Delta A_{\text{вых}}$ . А может ли наблюдаться эффект при поглощении двух фотонов, например, с энергией



$\hbar\omega_A/2$ , суммарная энергия которых соответствует фотону на красной границе?

Допустим, фотон с частотой  $\hbar\omega_1 = \hbar\omega_A/2$  поглотился. Возбужденное состояние, в которое перешел атом, называется **виртуальным состоянием**. Согласно принципу неопределенности  $\delta E \cdot \delta t \sim \hbar$  это состояние может существовать в течение времени

$$\delta t \sim \frac{\hbar}{\delta E} = \frac{\hbar}{\hbar\omega_A/2} = \frac{2}{\omega_A}.$$

Поскольку работа выхода составляет несколько электрон-вольт, то время очень мало:  $\delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta A_{\text{вых}}/2} \sim 10^{-16}$  с, оно в  $10^8$  мень-

ше характерного времени жизни атома в реальном возбужденном состоянии. Если в течение этого времени успевает поглотиться второй фотон с такой же энергией, то электрон, преодолевая потенциальный барьер, выходит из металла. Таким образом, **многофотонный процесс** представляет собой ряд последовательных переходов электрона по виртуальным состояниям.

Кроме рассмотренной модели двухфотонной ионизации атома, возможны также многофотонные процессы возбуждения атомов, при которых электрон в атоме переходит из начального невозбужденного состояния в реальное возбужденное состояние через последовательность виртуальных состояний.

Многофотонные процессы возможны при экстремально большой интенсивности излучения, когда среднее время между последовательными столкновениями фотонов с атомом меньше времени жизни электрона в виртуальном состоянии.

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D3.1.** Двухатомная молекула состоит из двух одинаковых атомов. Расстояние между атомами в молекуле  $d = 189$  пм. Молекула находится на первом вращательном энергетическом уровне и имеет угловую скорость  $\omega = 2,63 \cdot 10^{11}$  рад/с. Найти массу молекулы и определить, из каких атомов она состоит.

**Ответ:**  $m = \frac{4\sqrt{2}\hbar}{\omega d^2} \approx 38 \text{ а.е.м.}$  Молекулу составляют атомы

фтора.

**Задача D3.2.** Найти разность энергий между третьим и вторым вращательными энергетическими уровнями молекулы бромистого водорода HBr. Расстояние между атомами в молекуле  $d = 141,4 \text{ пм}$ . Молярная масса брома  $M_{\text{Br}} = 79,9 \text{ г/моль}$ .

**Ответ.**  $\Delta E = E_\ell - E_{\ell-1} = \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} [\ell(\ell+1) - (\ell-1)\ell] = \frac{\ell \hbar^2}{d^2} \frac{m_{\text{H}} + m_{\text{Br}}}{m_{\text{H}} m_{\text{Br}}} =$   
 $= 0,92 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} = 5,75 \text{ мэВ}, \text{ где } \mu = \frac{m_{\text{H}} m_{\text{Br}}}{m_{\text{H}} + m_{\text{Br}}} - \text{приведенная масса}$

молекулы.

**Задача D3.3.** Энергия вращательного движения молекулы хлора на некотором уровне возбуждения равна  $E_\ell = 2,7 \text{ мэВ}$ . Ковалентный радиус хлора (половина расстояния между ядрами двухатомной молекулы) равен  $r = 99 \text{ пм}$ , молярная масса  $M_{\text{Cl}} = 34,5 \text{ г/моль}$ . Найти механический момент импульса молекулы.

**Ответ:**  $M_\ell = 2r \sqrt{m_{\text{Cl}} E_\ell} = 9,87 \text{ Дж} \cdot \text{с} \approx 9,4 \hbar.$

**Задача D3.4.** Рассчитать интервал частот между соседними спектральными линиями двухатомной молекулы йода, предполагая, что все степени свободы данной молекулы – вращательные. Молярная масса атома йода (I) равна  $M_{\text{I}} = 126,9 \text{ г/моль}$ , ковалентный радиус  $r = 133 \text{ пм}$ .

**Ответ:**  $\Delta\omega = \omega_{\ell+1, \ell} - \omega_{\ell, \ell-1} = \frac{\hbar}{\mu d^2} = \frac{\hbar N_{\text{A}}}{2r^2 M_{\text{I}}} = 7,07 \cdot 10^9 \text{ рад/с}.$

**Задача D3.5.** Интервал между соседними спектральными линиями вращательного спектра хлороводорода (HCl) равен  $\Delta\omega = 3 \cdot 10^{12} \text{ рад/с}$ . Молярная масса хлора  $M_{\text{Cl}} = 35,5 \text{ г/моль}$ . Найти момент инерции  $J$  молекулы HCl и расстояние  $d$  между атомами.

**Ответ.**  $J = \frac{\hbar}{\Delta\omega} = 3,5 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$ ,  $d = \sqrt{\frac{J}{\mu}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\Delta\omega} \cdot \frac{m_{\text{Cl}} + m_{\text{H}}}{m_{\text{Cl}} m_{\text{H}}}} \approx$   
 $\approx 150 \text{ пм}.$

**Задача D3.6.** Собственная частота гармонических колебаний молекулы HCl равна  $\omega_0 = 5,6 \cdot 10^{14} \text{ рад/с}$ . Среднее расстояние между атомами  $d = 127,5 \text{ пм}$ . Оценить число энергетических уровней вращательного спектра молекулы, расположенных между первым  $n_1 = 1$  и вторым  $n_2 = 2$  энергетическими уровнями ее колебательного спектра. Молярная масса хлора  $M_{\text{Cl}} = 35,5 \text{ г/моль}$

**Ответ.** Из  $\frac{5}{2} \hbar \omega_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} \ell_2 (\ell_2 + 1)$  и  $\frac{3}{2} \hbar \omega_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu d^2} \ell_1 (\ell_1 + 1)$ ,

где  $\mu = \frac{m_{\text{H}} m_{\text{Cl}}}{m_{\text{H}} + m_{\text{Cl}}}$  следует  $\Delta\ell = \ell_2 - \ell_1 \approx \sqrt{\frac{\mu d^2 \omega_0}{\hbar}} (\sqrt{5} - \sqrt{3}) \approx 6.$

**Задача D3.7.** Считая расстояние между атомами в молекуле  $\text{F}_2$  неизменным и равным  $d = 141,2 \text{ пм}$ , оценить, сколько линий содержит вращательный спектр молекул, частота вращения которых  $\omega = 1,72 \cdot 10^{14} \text{ рад/с}$ . Молярная масса фтора  $M_{\text{F}} = 19 \text{ г/моль}$ .

**Ответ:**  $\ell = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \left[ \frac{m_{\text{F}} d^2 \omega}{2\hbar} \right]^2} \approx \frac{M_{\text{F}} d^2 \omega}{2N_A \hbar} \approx 540.$

## Глава 4

СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ  
В ОДНОМЕРНОМ ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ

## §4.1. Теоретическое введение

**1. Операторы.** В квантовой механике каждой физической величине  $a$  ставится в соответствие определенный **линейный оператор**  $\hat{a}$  (определенная математическая операция).

Например, **оператор импульса**  $\hat{\mathbf{p}}$  в координатном представлении имеет вид

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$$

или в декартовой системе координат:

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

Действие оператора импульса, например, на волновую функцию свободной частицы, движущейся вдоль оси  $OX$  (волну де Бройля  $\Psi(x, t) = C \exp[i(\omega t - kx)]$ ), сводится к умножению волновой функции на импульс частицы:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \Psi(x, t) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} C \exp[i(\omega t - kx)] = \\ &= \hbar k \cdot C \exp[i(\omega t - kx)] = p \Psi(x, t). \end{aligned}$$

Если полученную функцию  $p \Psi(x, t)$  умножить на комплексно сопряженную волновую функцию  $\Psi^*(x, t)$  и проинтегрировать по всему пространству ( $sp$ ), то получим импульс свободной частицы:

$$\int_{sp} \Psi^*(x, t) [p \Psi(x, t)] d\tau = p \int_{sp} \Psi(x, t) \Psi^*(x, t) d\tau = p.$$

Здесь учтено условие нормировки  $\int_{sp} \Psi(r, t) \Psi^*(r, t) d\tau = 1$ .

**Оператор кинетической энергии**

$$\hat{H}_{\text{кин}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2.$$

Действие оператора кинетической энергии на волну де Бройля  $\Psi(x, t) = C \exp[i(\omega t - kx)]$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2} [C \exp(i\omega t - kx)] = \frac{p^2}{2m} \Psi(x, t)$$

сводится к умножению кинетической энергии на волновую функцию де Бройля.

Если полученное выражение умножить на  $\Psi^*(x, t)$  и проинтегрировать по всему пространству ( $sp$ ), то получим кинетическую энергию частицы:

$$\int_{sp} \Psi^*(x, t) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, t) \right] d\tau = \frac{p^2}{2m} \int_{sp} \Psi(x, t) \Psi^*(x, t) d\tau = \frac{p^2}{2m}.$$

**Оператор потенциальной энергии  $U(r)$ .** Его действие на волновую функцию есть просто умножение потенциальной энергии на волновую функцию:  $U(r)\Psi(r, t)$ .

У свободной частицы потенциальная энергия имеет одно и то же значение в любой точке пространства  $U(r) = U_0 = \text{const}$ . В частности, можно положить  $U_0 = 0$ . Умножая функцию  $U(r)\Psi(r, t)$  на  $\Psi^*(r, t)$  и интегрируя по всему пространству ( $sp$ ), получаем потенциальную энергию  $U(r) = U_0 = \text{const}$  свободной частицы:

$$\int_{sp} \Psi^*(x, t) U(r) \Psi(x, t) d\tau = U_0 = \text{const}.$$

**Оператор полной механической энергии** является оператором Гамильтона и для одной частицы, находящейся в поле с потенциальной энергией  $U(x, y, z)$ , имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z). \quad (4.1)$$

Действие оператора полной механической энергии на волну де Бройля с последующим умножением на  $\Psi^*(r, t)$  и интегрированием уравнения  $\hat{H}\Psi(r, t)$  (4.1) по всему пространству дает значение полной энергии частицы:

$$\frac{p^2}{2m} + U_0 = E.$$

**2. Собственные функции и собственные значения оператора.** В классической физике большинство физических величин принимают непрерывный ряд значений. В квантовой физике значения, которые может принимать физическая величина, могут как изменяться непрерывно, так и принимать дискретный набор значений.

Дискретные значения  $a_n$ , которые может принимать физическая величина  $a$ , называются **собственными значениями оператора  $\hat{a}$** . Собственные значения  $a_n$  некоторой физической величины  $a$  являются решениями уравнения

$$\hat{a}\Psi(r,t) = a\Psi(r,t),$$

где  $\hat{a}$  — оператор данной физической величины.

**Собственной функцией  $\Psi_n(r,t)$  оператора  $\hat{a}$**  называется такая волновая функция, действие на которую оператора  $\hat{a}$  сводится к простому умножению собственной функции  $\Psi_n(r,t)$  на собственное значение  $a_n$ :

$$\hat{a}\Psi_n(r,t) = a_n\Psi_n(r,t).$$

**3. Энергетические состояния.** В этой главе будем рассматривать систему (чаще всего одну частицу) в *постоянном внешнем поле*. В этом случае состояния системы являются **стационарными состояниями**, в которых энергия имеет определенное значение, не изменяющееся со временем.

В волновой функции, описывающей стационарное состояние, можно выделить сомножитель, зависящий от времени:

$$\Psi(r,t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \cdot \psi(r).$$

Волновая функция  $\psi(r)$  стационарного состояния без временной зависимости обозначается малой буквой  $\psi(r)$ .

Собственные волновые функции  $\psi_n(r)$  стационарных состояний являются собственными функциями оператора Гамильтона:

$$\hat{H}\psi_n(r) = E_n\psi_n(r),$$

где  $E_n$  — собственные значения энергии в состояниях  $\psi_n(r)$ .

Стационарное состояние с наименьшим возможным значением энергии  $E_0$  называется **основным (нормальным) состоянием** системы.

Спектр собственных значений энергии может быть как непрерывным, так и дискретным. *Частица имеет дискретный спектр,*

если ее движение в пространстве ограничено, т.е. является **финитным**. Состояние частицы при этом называется **связанным** или **локализованным**.

Непрерывным спектром обладает частица, если ее движение не ограничено, и она может уходить на бесконечность. Таким образом, непрерывному спектру соответствует **инфинитное** движение.

Уравнение, управляющее изменением состояния системы ( $\Psi$  - функция во времени) было получено **Шредингером** в 1926 г. и имеет следующий вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t)+U(r)\psi(r,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}, \quad (4.2)$$

где  $i$  — мнимая единица ( $\sqrt{-1}$ ),  $m$  — масса частицы,  $\nabla^2$  — оператор Лапласа,  $U$  — потенциальная энергия.

Для определения вида стационарных волновых функций  $\psi(\mathbf{r})$ , когда  $\psi(r,t)$  принимает вид  $\psi(r,t)=\psi(r)e^{-i\omega t}$  ( $\omega=\frac{E}{\hbar}$ ), а также энергетического спектра частицы в потенциальном поле  $U(r)$  **Шредингером** было предложено **стационарное** линейное дифференциальное уравнение в частных производных:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+U(r)\psi(r)=E\psi(r). \quad (4.3)$$

Это уравнение играет в квантовой физике такую же важную роль, как дифференциальное уравнение движение в классической механике (II закону Ньютона). Уравнение Шредингера называют уравнением движения квантовой частицы.

Для свободной частицы  $U(r)=U_0=0$  и уравнение Шредингера можно записать в виде:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+E\psi(r)=0. \quad (4.4)$$

Волновая функция  $\psi(r)$ , являющаяся решением уравнения Шредингера (4.3), должна удовлетворять следующим условиям.

1. Волновая функция  $\psi(r)$  должна быть однозначной и непрерывной во всей области пространства (даже если  $U(x,y,z)$  имеет поверхности разрыва).

2. Производные волновой функции  $\partial\psi/\partial x$ ,  $\partial\psi/\partial y$  и  $\partial\psi/\partial z$  также должны быть непрерывными (кроме поверхностей, где по-

тенциальная энергия  $U \rightarrow \infty$ ). Так как частица не может проникнуть в область, где  $U \rightarrow \infty$ , то во всей этой области (и на ее границе)  $\psi = 0$ .

Ниже рассмотрим несколько задач, в которых потенциальная энергия является функцией только одной координаты  $U(x)$ .

**Задача 4.1. (Свободное движение частицы.)** Найти волновую функцию  $\psi(x)$  частицы, свободно движущейся в положительном направлении оси  $OX$  и обладающей импульсом  $p$ .

**Решение.** Уравнение Шредингера (4.4) для свободной частицы ( $U(x) = 0$ ), движущейся вдоль оси  $OX$ , имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + E\psi(x) = 0. \quad (4.5)$$

Решением этого уравнения является гармоническая функция

$$\psi(x) = A \exp\left(i \frac{p}{\hbar} x\right). \quad (4.6)$$

Для волны, бегущей в **положительном направлении оси  $OX$** , здесь и в дальнейшем будем выбирать **знак «плюс»** в показателе экспоненты.

Можно записать полную волновую функцию с временным множителем:

$$\Psi(x, t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} t - px\right)\right].$$

**Ответ.**  $\Psi(x, t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} t - px\right)\right].$

#### §4.2. Непрерывный спектр энергии

**Задача 4.2. (Потенциальная ступенька. Непрерывный спектр.)** Потенциальная энергия частицы имеет вид «ступеньки»:  $U = 0$  при  $x < 0$  и  $U = U_0$  при  $x > 0$  (см. рис. 4.1 а). Частица, движущаяся к ступеньке («падающая» на ступеньку) из области  $x \rightarrow -\infty$ , имеет импульс  $p_1$  и амплитуду  $A_1$  волновой функции. Найти волновую функцию частицы. Масса частицы  $m$ .



**Решение.** При  $x \rightarrow -\infty$  функция  $\psi(x)$  представляет собой бегущую в положительном направлении оси  $Ox$  волну де Бройля (рис. 4.1 б)

$$\psi'_1(x \rightarrow -\infty) = A_1 e^{ip_1 x / \hbar}.$$

Рассмотрим отдельно случай I, когда кинетическая энергия  $E_1$  падающей на ступеньку частицы больше высоты ступеньки, т.е.  $E_1 > U_0$ , и случай II, когда  $E_1 < U_0$ .

**Случай I.** Энергия частицы  $E_1$  больше высоты «ступеньки» т.е.  $E_1 > U_0$ .

В области 1 уравнению Шредингера (4.5)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + E\psi(x) = 0$$

удовлетворяют как волна бегущая в положительном направлении, так и в отрицательном направлении оси  $Ox$ . Поэтому в этой области решение запишем в общем виде, как сумму падающей волны

$$\psi'_1 = A_1 \exp\left[i \frac{p_1 x}{\hbar}\right] \quad (4.6) \text{ с амплитудой } A_1 \text{ и отраженной волны}$$

$$\psi''_1 = A_3 \exp\left[-i \frac{p_1 x}{\hbar}\right] \text{ с амплитудой } A_3:$$

$$\psi_1 = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_3 e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}}, \quad (4.7)$$

где  $p_1 = \sqrt{2mE_1}$ .

Обратим внимание на то, что амплитуда  $A_3$ , в общем случае – комплексная величина.

В области 2 решение уравнения Шредингера

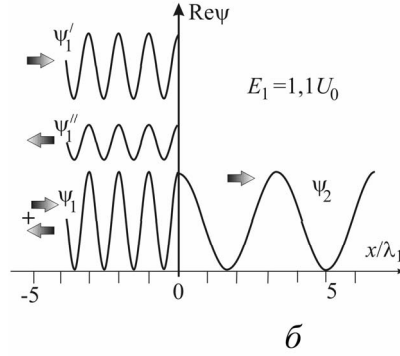
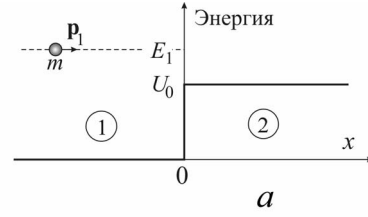


Рис. 4.1. Потенциальная энергия частицы в виде «ступеньки» (а) и действительные части волновых функций в зависимости от координаты  $x$  в единицах длины волны частицы, падающей на барьер из области  $x \rightarrow -\infty$  при  $E_1 > U_0$  (б).

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + |E - U_0| \psi(x) = 0$$

может иметь вид только прошедшей волны с амплитудой  $A_2$  :

$$\psi_2 = A_2 e^{i \frac{p_2 x}{\hbar}}. \quad (4.8)$$

Импульс частицы  $p_2$  в области 2 находится из закона сохранения механической энергии частицы  $E_1 = E_2 + U_0$ , где  $E_2$  – кинетическая энергия частицы в области 2. Получаем

$$p_2 = \sqrt{2mE_2} = \sqrt{2m(E_1 - U_0)}. \quad (4.9)$$

На границе областей используем условия непрерывности волновой функции  $\psi(x)$  (а следовательно, непрерывности плотности вероятности  $\rho$ ) и ее производной  $\partial\psi/\partial x$  :

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0), \\ \left. \frac{\partial\psi_1}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial\psi_2}{\partial x} \right|_{x=0}. \end{cases} \quad (4.10)$$

Подставляя (4.8) и (4.9) в систему (4.10), получаем

$$\begin{cases} A_1 + A_3 = A_2, \\ p_1 A_1 - p_1 A_3 = p_2 A_2. \end{cases} \quad (4.11)$$

Решая систему (4.11), находим

$$A_2 = \frac{2A_1}{1 + p_2/p_1}, \quad A_3 = A_1 \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2}. \quad (4.12)$$

Зная амплитуды (4.12), можно записать волновую функцию в области 1:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_1 \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}}$$

и в области 2:

$$\psi_2 = \frac{2A_1}{1 + p_2/p_1} e^{i \frac{p_2 x}{\hbar}}.$$

Используя для  $p_2$  выражение (4.9), окончательно получаем

$$\psi_1(x) = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_1 \frac{1 - \sqrt{1 - 2mU_0 / p_1^2}}{1 + \sqrt{1 - 2mU_0 / p_1^2}} e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}},$$

$$\psi_2 = \frac{2A_1}{1 + \sqrt{1 - 2mU_0 / p_1^2}} e^{i \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} x / \hbar}.$$

Действительные части волновых функций  $\psi'_1$ ,  $\psi''_1$ ,  $\psi_1 = \psi'_1 + \psi''_1$  и  $\psi_2$  представлены на рис. 4.1 б. Расчет проводился при  $A_1 = 1$ ,  $p_1 / \hbar = 1$  и  $E_1 = 1,1U_0$ .

Обратим внимание на то, что падающая волна  $\psi'_1$  расщепляется на прошедшую  $\psi_2$  и отраженную  $\psi''_1$  волны. Появление в области 1 отраженной волны  $\psi''_1$  называется *надбарьерным отражением* и представляет собой *чисто квантовое явление*.

Приведем один *пример надбарьерного отражения*.

Рассмотрим неупорядоченный, легированный донорами полупроводник (см. ниже задачу 10.5). Донор — это атом вещества на единицу большей валентности, чем атом исходного полупроводника (матрицы), в котором он занимает место атома матрицы. Ионами донорной примеси создаются потенциальные ямы для электронов. Свободный электрон, находящийся в зоне проводимости, движется над потенциальными ямами. От каждой потенциальной ямы образуется надбарьерная отраженная волна. Если отраженные от разных ям волны будут интерферировать, то отраженная волна может стать по интенсивности сравнима с падающей. Это означает, что возникает столь значительное отражение, что электрон локализуется в некоторой области полупроводника и уже не сможет принимать участие, например, в электропроводности.

### Вопросы для самопроверки

1. Почему длина волны частицы в области 2 больше, чем в области 1 (см. рис. 4.1)?
2. Как отличаются действительные части волновых функций по амплитуде и длине волны для частиц с энергией  $E_1 = 1,1U_0$  и  $E_1 = 1,2U_0$ ?

**Ответы на вопросы**

1. Длина волны в области 2 больше, чем в области 1, так как в области 2 появляется потенциальная энергия  $U_0 > 0$ , и по закону сохранения полной механической энергии кинетическая энергия уменьшается, а, следовательно, уменьшается импульс и возрастает длина волны.

2. На рис. 4.2 приведены действительные части волновых функций, вычисленные при  $A_1 = 1$  и  $p_1/\hbar = 1$  в двух случаях:  $E_1 = 1,1U_0$  (а) и  $E_1 = 1,2U_0$  (б). Чем выше ступенька (меньше отношение  $E_1/U_0$ ), тем сильнее надбарьерное отражение, больше амплитуда отраженной волны и меньше амплитуда волны, прошедшей во вторую область, а также больше длина волны (см. п. 1).

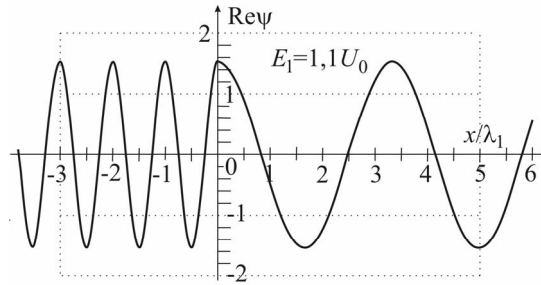
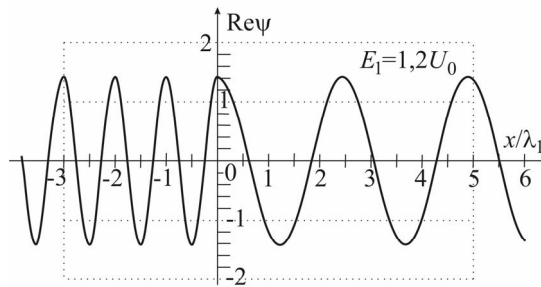
**а****б**

Рис. 4.2. Сравнение  $\text{Re}\psi(x/\lambda_1)$  при движении частицы к барьеру – ступеньке разной высоты (разном отношении  $E_1/U_0$ ). При расчетах полагалось  $A_1 = 1$ ,  $p_1/\hbar = 1$ ,  $E_1 = 1,1U_0$  (а) и  $E_1 = 1,2U_0$  (б).

**Случай II. Энергия частицы  $E_1$  меньше высоты «ступеньки»  $E_1 < U_0$  (рис. 4.3 а).**

Аналогично предыдущему случаю в области 1 решению уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + E\psi(x) = 0$$

соответствует суперпозиция падающей волны  $\psi_1'$  с амплитудой  $A_1$  и отраженной волны  $\psi_1''$  с амплитудой  $A_3$ :

$$\psi_1 = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_3 e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}}, \quad (4.13)$$

где  $p_1 = \sqrt{2mE_1}$ .

Решением уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) - |E - U_0| \psi(x) = 0 \quad (4.14)$$

в области 2, когда вторая производная волновой функции равна самой функции, является экспоненциально убывающая волновая функция

$$\psi_2 = A_2 e^{-\gamma x}, \quad (4.15)$$

где  $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E_1)}$ .

Второе возможное решение  $\psi_2 = A_2 e^{+\gamma x}$  уравнения (4.14) не рассматривается, так как волновая функция везде должна быть конечной.

На границе областей используем условия непрерывности для  $\psi$  и для  $d\psi/dx$ :

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{и} \quad \left. \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \psi_2}{\partial x} \right|_{x=0}, \quad (4.16)$$

аналогичные (4.10).

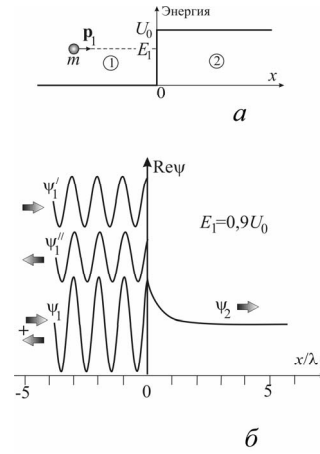


Рис. 4.3. а — «Ступенька» потенциальной энергии частицы; б — действительные части волновых функций (4.13) и (4.15) в зависимости от координаты  $x$  в единицах длины волны частицы, падающей на барьер из области  $x \rightarrow -\infty$  при  $E_1 < U_0$ .

Подставляя функции (4.13) и (4.15) в систему (4.16), получаем

$$\begin{cases} A_1 + A_3 = A_2, \\ -A_1 + A_3 = i \frac{\gamma \hbar}{p_1} A_2. \end{cases} \quad (4.17)$$

Решение системы (4.17):

$$A_2 = \frac{2A_1}{1 + i\gamma\hbar/p_1}, \quad A_3 = A_1 \frac{p_1 - i\gamma\hbar}{p_1 + i\gamma\hbar}. \quad (4.18)$$

Используя запись комплексного числа в виде  $a + ib = \sqrt{a^2 + b^2} \exp[i \arctg(b/a)]$ , преобразуем соотношения (4.18), выделяя фазу:

$$A_2 = \frac{2A_1}{1 + i\gamma\hbar/p_1} = \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma\hbar/p_1)^2}} e^{-i\varphi_1}, \quad (4.19)$$

$$A_3 = A_1 \frac{p_1 - i\gamma\hbar}{p_1 + i\gamma\hbar} = A_1 e^{-i\varphi_2}, \quad (4.20)$$

$$\text{где } \operatorname{tg}\varphi_1 = \gamma\hbar/p_1, \quad \operatorname{tg}\varphi_2 = \frac{2p_1\gamma\hbar}{p_1^2 - (\gamma\hbar)^2}, \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - p_1^2}.$$

На рис. 4.3 б изображены волновые функции  $\psi'_1$ ,  $\psi''_1$ ,  $\psi_1 = \psi'_1 + \psi''_1$  и  $\psi_2$ . При расчетах полагалось  $A_1 = 1$ ,  $p_1/\hbar = 1$ ,  $E_1 = 0,9 U_0$ .

Во-первых, обратим внимание на то, что амплитуда отраженной волны  $\psi''_1$  равна амплитуде падающей волны  $\psi'_1$ :  $|A_3| = |A_1|$  (4.20), т. е. плотности потока вероятности (см. ниже, гл. 5) в падающей, и в отраженной волнах одинаковые. Фаза отраженной волны относительно падающей не равна нулю:  $\varphi_2 \neq 0$ , то есть при отражении от барьера происходит *сдвиг фазы*.

Во-вторых, поскольку  $|\psi_2| \neq 0$ , то можно говорить о проникновении частицы в область 2. Определим **глубину проникновения** в область 2 как расстояние, на котором амплитуда  $|\psi_2|$  убывает в  $e$  раз. Используя (4.15), глубину проникновения получаем равной

$$\gamma^{-1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E_1)}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 - p_1^2}}. \quad (4.21)$$

В этом принципиальное отличие поведения квантовой частицы от классической частицы, которая не может оказаться в области, где  $U > E_1$ , так как в этой области ее кинетическая энергия должна стать (по закону сохранения энергии) отрицательной:  $E_2 = E_1 - U_0 < 0$ . В квантовой механике, в силу соотношения неопределенностей, при локализации частицы в некоторой точке она перестает характеризоваться определенной кинетической энергией.

Глубина проникновения  $\gamma^{-1}$  тем больше, чем ближе значение  $E_1$  к  $U_0$  (см. рис. 4.4). На больших  $x \gg \lambda$  прошедшая волна практически отсутствует.

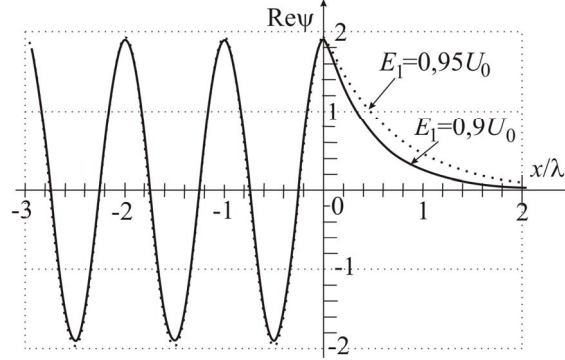


Рис. 4.4. Действительная часть волновой функции в зависимости от координаты  $x$  в единицах длины волны частицы, падающей на потенциальный барьер в виде ступеньки из области  $x \rightarrow -\infty$  при  $E_1 < U_0$ . При компьютерном расчете полагалось  $A_1 = 1$ ,  $p_1/\hbar = 1$ ,  $E_1 = 0,9 U_0$  (сплошная кривая)  $E_1 = 0,95 U_0$  (пунктирная кривая).

Поскольку  $|A_3| = |A_1|$ , то можно сделать вывод, что в случае  $E_1 > U_0$  происходит полное отражение падающей волны от ступеньки.

Итак, волновая функция в области 1 имеет вид:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ip_1 x/\hbar} + A_1 e^{-i(p_1 x/\hbar + \varphi_2)},$$

а в области 2:

$$\psi_2(x) = \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma\hbar/p_1)^2}} e^{-\gamma x - i\varphi_1},$$

$$\text{где } \gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E_1)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - p_1^2}, \quad \text{tg}\varphi_1 = \frac{\gamma\hbar}{p_1}, \quad \text{tg}\varphi_2 = \frac{2p_1\gamma\hbar}{p_1^2 - (\gamma\hbar)^2}.$$

**Ответ.** В случае I:

$$\text{при } x < 0 \quad \psi_1(x) = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_1 \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}},$$

$$\text{при } x > 0 \quad \psi_2(x) = \frac{2A_1}{1 + p_2/p_1} e^{i \frac{p_2 x}{\hbar}}, \text{ где } p_2 = \sqrt{p_1^2 - 2mU_0}.$$

$$\text{В случае II: при } x < 0 \quad \psi_1(x) = A_1 e^{ip_1 x/\hbar} + A_1 e^{-i(p_1 x/\hbar + \varphi_2)},$$

$$\text{при } x > 0 \quad \psi_2(x) = \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma\hbar/p_1)^2}} e^{-\gamma x - i\varphi_1}, \text{ где } \gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - p_1^2},$$

$$\operatorname{tg} \varphi_1 = \gamma\hbar/p_1, \quad \operatorname{tg} \varphi_2 = \frac{2p_1\gamma\hbar}{p_1^2 - (\gamma\hbar)^2}.$$

**Задача 4.3. (Прямоугольный барьер. Непрерывный спектр.)**

Изменение потенциальной энергии частицы вдоль оси  $Ox$  имеет вид прямоугольного потенциального барьера, высота которого  $U_0$ ,

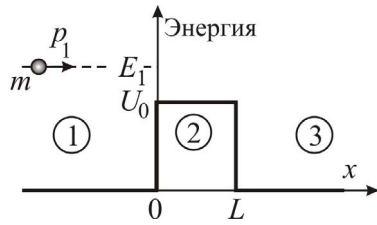


Рис. 4.5. Прямоугольный потенциальный барьер имеет высоту  $U_0$ . Кинетическая энергия  $E_1$  частицы, летящей из области  $x \rightarrow -\infty$  больше высоты барьера:  $E_1 > U_0$ .

ширина  $L$  (рис. 4.5). Частица, движущаяся к барьеру (падающая на барьер) из области  $x \rightarrow -\infty$ , имеет импульс  $p_1$ , амплитуду волновой функции  $A_1$  и массу  $m$ . Найти волновую функцию частицы.

**Решение.** Рассмотрим, аналогично предыдущей задаче 4.2, два случая: I) кинетическая энергия падающей на барьер частицы больше высоты барьера, т.е.  $E_1 > U_0$  и II)  $E_1 < U_0$ .

**Случай I.  $E_1 > U_0$  (рис. 4.5).**

В области I ( $x < 0$ ) решение уравнения Шредингера, как и в задаче 4.2, представляет собой суперпозицию падающей волны  $\psi'_1$  с амплитудой  $A_1$  и отраженной волны  $\psi''_1$  с амплитудой  $A_2$ :

$$\psi_1 = \psi'_1 + \psi''_1 = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_2 e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}}, \quad p_1 = \sqrt{2mE_1}. \quad (4.22)$$



В области 2 ( $0 < x < L$ ) уравнение Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + |E - U_0| \psi(x) = 0$$

имеет такой же вид как в задаче 4.2 (случай I), но в решении следует учесть отраженную от скачка потенциала в точке  $x = L$  волну

$\psi_2'' = A_4 e^{-i \frac{p_2 x}{\hbar}}$  с амплитудой  $A_4$  (еще одно надбарьерное отражение). Тогда волновая функция в области 2 запишется в виде

$$\psi_2(x) = \psi_2' + \psi_2'' = A_3 e^{i \frac{p_2 x}{\hbar}} + A_4 e^{-i \frac{p_2 x}{\hbar}}, \quad (4.23)$$

где  $p_2 = \sqrt{2m(E_1 - U_0)} = \sqrt{p_1^2 - 2mU_0}$ .

Наконец, в области 3 ( $x > L$ ), как и в задаче 4.2 (случай I), имеется только прошедшая волна

$$\psi_3 = A_5 e^{i \frac{p_1}{\hbar}(x-L)}. \quad (4.24)$$

Обратим внимание на то, что амплитуды волн  $A_2$ ,  $A_3$  и  $A_4$  – комплексные величины, каждая из которых учитывает суперпозицию волн, многократно отраженных и/или прошедших границы  $x = 0$  и  $x = L$ . Например, в  $A_2$  учитывается первично отраженная волна от границы  $x = 0$  плюс та часть прошедшей границу  $x = 0$ , которая отразилась от границы  $x = L$ , а затем прошла через границу  $x = 0$  и т.д.

Таким образом, находится такое самосогласованное решение, при котором волновые функции, являющиеся суперпозицией всех волн в каждой из областей, удовлетворяют граничным условиям непрерывности как самих волновых функций, так и их производных.

Условия непрерывности волновой функции и ее производной в точке  $x = 0$  (аналогичные (4.17)):

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= A_3 + A_4, \\ A_1 - A_2 &= \frac{p_2}{p_1} (A_3 - A_4). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Из непрерывности  $\psi$  и  $\partial\psi/\partial x$  в точке  $x = L$  находим

$$A_3 e^{i \frac{p_2}{\hbar} L} + A_4 e^{-i \frac{p_2}{\hbar} L} = A_5. \quad (4.26)$$

$$A_3 e^{i \frac{p_2}{\hbar} L} - A_4 e^{-i \frac{p_2}{\hbar} L} = \frac{p_1}{p_2} A_5. \quad (4.27)$$

Решая линейную систему уравнений (4.25)–(4.27) относительно амплитуд  $A_2$ ,  $A_3$ ,  $A_4$ ,  $A_5$ , получаем:

$$A_2 = \frac{A_1 (1 - \exp(2ip_2 L / \hbar)) (p_1^2 - p_2^2)}{(p_1 + p_2)^2 - \exp(2ip_2 L / \hbar) (p_1 - p_2)^2}, \quad (4.28)$$

$$A_3 = \frac{A_1 2 p_1 (p_1 + p_2)}{(p_1 + p_2)^2 - \exp(2ip_2 L / \hbar) (p_1 - p_2)^2}, \quad (4.29)$$

$$A_4 = \frac{A_1 2 p_1 (p_2 - p_1) \exp(2ip_2 L / \hbar)}{(p_1 + p_2)^2 - \exp(2ip_2 L / \hbar) (p_1 - p_2)^2}, \quad (4.30)$$

$$A_5 = \frac{4 A_1 p_1 p_2 \exp(ip_2 L / \hbar)}{(p_1 + p_2)^2 - \exp(2ip_2 L / \hbar) (p_1 - p_2)^2}; \quad (4.31)$$

Комплексные амплитуды (4.28)–(4.31) запишем в виде  $A = |A| e^{-i\varphi}$ , используя заданные в задаче параметры:

$$A_2 = A_1 \frac{2mU_0 \sin \left[ \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} L / \hbar \right]}{\Delta_1} e^{i\varphi_2}, \quad (4.32)$$

$$A_3 = A_1 \frac{p_1 \left[ p_1 + \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \right]}{\Delta_1} e^{i\varphi_3}, \quad (4.33)$$

$$A_4 = A_1 \frac{p_1 \left[ \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} - p_1 \right]}{\Delta_1} e^{i\varphi_4}, \quad (4.34)$$

$$A_5 = A_1 \frac{2 p_1 \sqrt{p_1^2 - 2mU_0}}{\Delta_1} e^{i\varphi_5}, \quad (4.35)$$

где

$$\Delta_1 = \sqrt{2} \sqrt{2p_1^4 - 4mU_0p_1^2 + (mU_0)^2 - (mU_0)^2 \cos \left[ \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \cdot 2L/\hbar \right]},$$

$$\operatorname{tg} \varphi_2 = - \frac{p_1 \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \cdot \sin \left[ \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \cdot 2L/\hbar \right]}{\left[ p_1^2 - mU_0 \right] \left( 1 - \cos \left[ \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \cdot 2L/\hbar \right] \right)},$$

$$\operatorname{tg} \varphi_3 = \frac{- \left[ p_1 - \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \right]^2 \cdot \sin \left[ \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \cdot 2L/\hbar \right]}{\left[ p_1 + \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \right]^2 - \left[ p_1 - \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \right]^2 \cos \left[ \sqrt{p_1^2 - 2mU_0} \cdot 2L/\hbar \right]}.$$

Так как (5.29) можно представить в виде

$$A_4 = A_3 \frac{p_2 - p_1}{p_1 + p_2} \exp(i2p_2L/\hbar),$$

а (4.31) — в виде

$$A_5 = A_3 \frac{2p_2}{p_1 + p_2} \exp(ip_2L/\hbar),$$

то  $\varphi_4 = \varphi_3 + 2p_2L/\hbar$ , а  $\varphi_5 = \varphi_3 + p_2L/\hbar$ .

Общий вид волновых функций:

при  $x < 0$

$$\psi_1(x) = A_1 \left( e^{i\frac{p_1x}{\hbar}} + \frac{2mU_0 \sin(p_2L/\hbar)}{\Delta_1} e^{-i\frac{p_1x}{\hbar} + i\varphi_2} \right),$$

при  $0 < x < L$

$$\psi_2(x) = A_1 \frac{p_1}{\Delta_1} \left( (p_1 + p_2) e^{i\frac{p_2x}{\hbar} + i\varphi_3} + (p_2 - p_1) e^{-i\frac{p_2x}{\hbar} + i\varphi_4} \right),$$

при  $x > L$

$$\psi_3(x) = A_1 \frac{2p_1p_2}{\Delta_1} e^{i\frac{p_1x}{\hbar} + i\varphi_5}.$$

Для анализа полученного решения (4.32)–(4.35) проведен количественный расчет. При этом полагалось  $A_1 = 1$ ,  $p_1/\hbar = 1$ ,  $E_1 = 1,1U_0$ ,  $L = 6\lambda_1 = 12\pi\hbar/p_1$ . На рис. 4.6 б представлены действительные части волновых функций:  $\psi'_1(x) = A_1 e^{ip_1x/\hbar}$  и

$\psi_2'(x) = A_3 e^{ip_2 x/\hbar}$  – волн, бегущих в положительном направлении оси  $OX$ ;  $\psi_1''(x) = A_2 e^{-ip_1 x/\hbar}$  и  $\psi_2''(x) = A_4 e^{-ip_2 x/\hbar}$  – отраженных волн, бегущих в отрицательном направлении оси  $OX$ ;  $\psi_1 = \psi_1' + \psi_1''$  и  $\psi_2 = \psi_2' + \psi_2''$  – результирующих волн в 1-й и во 2-й областях соответственно,  $\psi_3 = A_5 e^{i(p_1/\hbar)(x-L)}$  – волны в области 3.

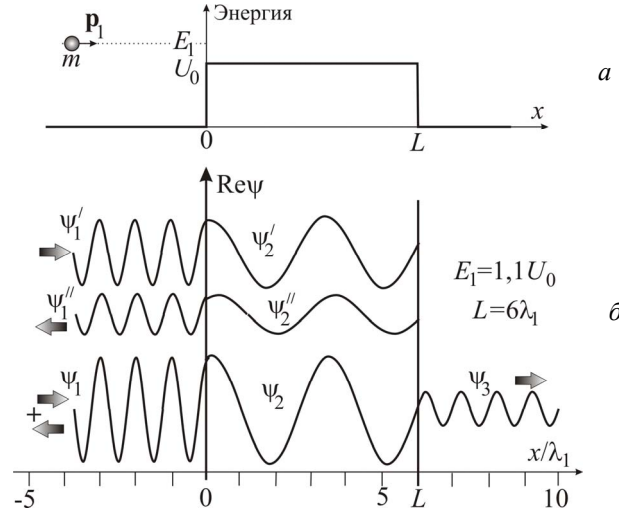


Рис. 4.6. *а* – частица движется к прямоугольному потенциальному барьеру, *б* – действительные части волновых функций (см. (4.22) и (4.23))  $\psi_1'$ ,  $\psi_1''$ ,  $\psi_2'$ ,  $\psi_2''$ ,  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  и  $\psi_3$ .

Заметим, что длина волны частицы, зависящая от значения потенциальной энергии, одинакова в областях 1 и 3. Длина волны в области 2 больше, чем в 1, что связано с возрастанием в области 2 потенциальной энергии, и как следствие — с уменьшением кинетической энергии и импульса, что приводит к увеличению длины волны.

Амплитуда волновой функции (амплитуда плотности вероятности нахождения) в области 3 зависит от ширины и высоты барьера. Чем уже барьер, тем больше амплитуда, то есть меньше сказывается надбарьерное отражение. На рис 4.7 сравниваются действительные части волновых функций при одной и той же высоте, но разной ширине барьера. При компьютерных расчетах полагалось

$A_1 = 1$ ,  $p_1/\hbar = 1$ ,  $E_1 = 1,1U_0$ ,  $L = 6\lambda_1 = 12\pi\hbar/p_1$  (рис 4.7a) и  $L = 2,12\lambda_1 = 13,31\hbar/p_1$  (рис 4.7б).

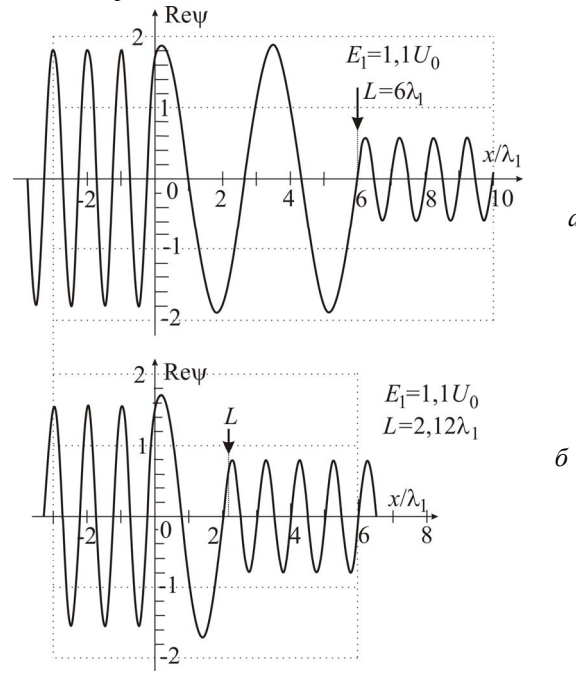


Рис. 4.7. Действительная часть волновой функции частицы, падающей на прямоугольный барьер в случае  $L = 6\lambda_1$  (a) и  $L = 2,12\lambda_1$  (б).

Приведем результаты расчетов для случая  $L = 2,12\lambda_1 = 13,31\hbar/p_1$ . Из решений (4.28)–(4.31) следуют комплексные выражения для амплитуд:  $A_2 = 0,679 - 0,324i$ ,  $A_3 = 1,372 + 0,376i$ ,  $A_4 = 0,307 - 0,700i$ ,  $A_5 = -0,283 - 0,594i$ , на основании которых находятся действительные части волновых функций частицы в трех областях:

$$\text{Re}\psi_1(x) = \text{Re} \left[ A_1 e^{i\frac{p_1 x}{\hbar}} + A_2 e^{-i\frac{p_1 x}{\hbar}} \right] = \cos x + 0,679 \cos x - 0,324 \sin x, \quad (4.36)$$

$$\operatorname{Re} \psi_2(x) = \operatorname{Re} \left[ A_3 e^{i \frac{p_2 x}{\hbar}} + A_4 e^{-i \frac{p_2 x}{\hbar}} \right] = 1,679 \cos 0,301x - 1,076 \sin 0,301x, \quad (4.37)$$

$$\operatorname{Re} \psi_3(x) = \operatorname{Re} A_5 e^{i \frac{p_1}{\hbar}(x-L)} = -0,283 \cos(x-13,289) + 0,594 \sin(x-13,289). \quad (4.38)$$

Действительные части волновых функций (4.36)–(4.38) изображены на рис. 4.7 б.

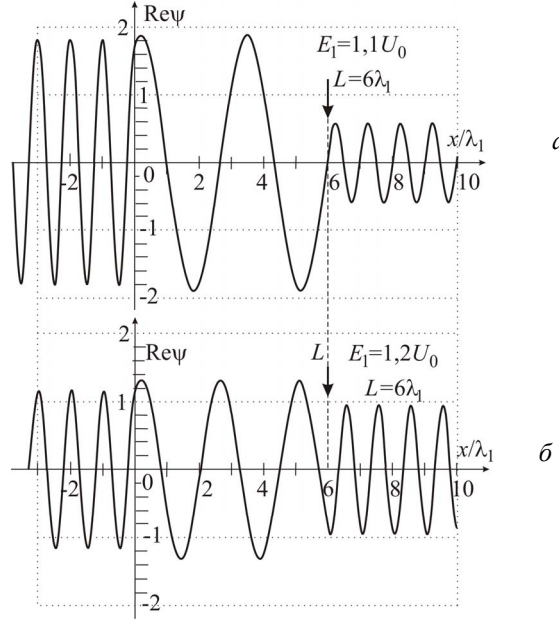


Рис. 4.8. Действительная часть волновой функции частицы, падающей на прямоугольный барьер в случае  $E_1 = 1,1U_0$  (а) и  $E_1 = 1,2U_0$  (б).

Чем выше барьер, т. е. чем меньше величина  $E_1/U_0$ , тем меньше амплитуда в области 3, так как больше влияние надбарьерного отражения. На рис. 4.8 для сравнения приведены компьютерные расчеты действительных частей волновых функций при  $A_1 = 1$ ,  $p_1/\hbar = 1$ ,  $L = 6\lambda_1 = 12\pi\hbar/p_1$  для двух случаев:  $E_1 = 1,1U_0$  (а) и  $E_1 = 1,2U_0$  (б).

**Случай II.**  $E_1 < U_0$  (см. рис. 4.9).

Уравнение Шредингера в области 2

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) - |E - U_0| \psi(x) = 0. \quad (4.39)$$

В общем случае решение  $\psi_2(x)$  уравнения (4.39) можно записать как сумму двух волн в виде:

$$\psi_2(x) = A_3 e^{\gamma x} + A_4 e^{-\gamma x}, \quad (4.40)$$

где  $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E_1)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - p_1^2}$  (сравните с формулой (4.15) задачи 4.2).

Волновые функции в областях 1 и 3 имеют такой же вид (4.22) и (4.24), как и в случае  $E_1 > U_0$ .

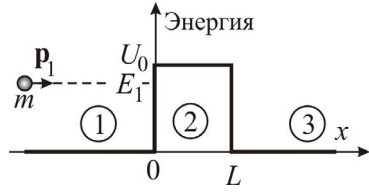


Рис. 4.9. Прямоугольный потенциальный барьер имеет высоту  $U_0$ . Кинетическая энергия  $E_1$  частицы, летящей из области  $x \rightarrow -\infty$ , меньше высоты барьера:  $E_1 < U_0$ .

Граничные условия на  $\psi_1$  и  $\psi_2$  и их производные в точке  $x = 0$ :

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 &= A_3 + A_4, \\ A_1 - A_2 &= \frac{\hbar\gamma}{ip_1} (A_3 - A_4); \end{aligned} \quad (4.41)$$

в точке  $x = L$ :

$$A_3 e^{\gamma L} + A_4 e^{-\gamma L} = A_5, \quad (4.42)$$

$$A_3 e^{\gamma L} - A_4 e^{-\gamma L} = i \frac{p_1}{\gamma \hbar} A_5. \quad (4.43)$$

Решая линейную неоднородную систему уравнений (4.41)–(5.43) относительно амплитуд  $A_2$ ,  $A_3$ ,  $A_4$ ,  $A_5$ , находим:

$$A_2 = \frac{(\exp(2\gamma L) - 1)(\hbar^2 \gamma^2 + p_1^2)}{(-i\hbar\gamma + p_1)^2 - (i\hbar\gamma + p_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1; \quad (4.44)$$

$$A_3 = \frac{2p_1(-i\hbar\gamma + p_1)}{(-i\hbar\gamma + p_1)^2 - (i\hbar\gamma + p_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1; \quad (4.45)$$

$$A_4 = \frac{2p_1(-i\hbar\gamma - p_1) \exp(2\gamma L)}{(-i\hbar\gamma + p_1)^2 - (i\hbar\gamma + p_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1; \quad (4.46)$$

$$A_5 = \frac{-4ip_1\hbar\gamma \exp(\gamma L)}{(-i\hbar\gamma + p_1)^2 - (i\hbar\gamma + p_1)^2 \exp(2\gamma L)} A_1. \quad (4.47)$$

Записывая комплексные амплитуды через их модули и фазы, получаем

$$A_2 = A_1 \frac{\sqrt{2}mU_0 \operatorname{Sh}\left(\sqrt{2mU_0 - p_1^2} L / \hbar\right)}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_2}, \quad (4.48)$$

$$A_3 = A_1 \frac{\sqrt{2}p_1mU_0 \exp\left(-\sqrt{2mU_0 - p_1^2} L / \hbar\right)}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_3}, \quad (4.49)$$

$$A_4 = A_1 \frac{\sqrt{2}p_1mU_0 \exp\left(\sqrt{2mU_0 - p_1^2} L / \hbar\right)}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_4}, \quad (4.50)$$

$$A_5 = A_1 \frac{\sqrt{2}p_1\sqrt{2mU_0 - p_1^2}}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_5}, \quad (4.51)$$

где

$$\Delta_{II} = \sqrt{-2p_1^4 + 4p_1^2mU_0 - (mU_0)^2 + (mU_0)^2 \operatorname{Ch}\left[\sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar\right]},$$

$$\operatorname{tg} \bar{\varphi}_2 = \frac{-p_1 \left(1 + \exp\left[\sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar\right]\right) \sqrt{2mU_0 - p_1^2}}{mU_0 \left(1 - \exp\left[\sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar\right]\right)},$$



$$\operatorname{tg} \bar{\varphi}_3 = \frac{\sqrt{2mU_0 - p_1^2} \left[ mU_0 - (mU_0 - 2p_1^2) \exp \left[ \sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar \right] \right]}{p_1 \left[ mU_0 + (3mU_0 - 2p_1^2) \exp \left[ \sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar \right] \right]},$$

$$\operatorname{tg} \bar{\varphi}_4 = \frac{\sqrt{2mU_0 - p_1^2} \left[ 2p_1^2 - mU_0 + mU_0 \exp \left( \sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar \right) \right]}{p_1 \left[ 2p_1^2 - 3mU_0 - mU_0 \exp \left( \sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar \right) \right]}.$$

Так как можно представить:  $A_5 = -iaA_2$ , где  $a$  – действительное число, то  $\bar{\varphi}_5 = \bar{\varphi}_2 + 3\pi/2$ .

Общий вид волновых функций:

при  $x < 0$ :

$$\psi_1(x) = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_1 \frac{\sqrt{2mU_0} \operatorname{Sh}(\gamma L)}{\Delta_{II}} e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar} + i \bar{\varphi}_2};$$

при  $0 < x < L$ :

$$\psi_2(x) = A_1 \frac{\sqrt{2} p_1 m U_0}{\Delta_{II}} \left( e^{\gamma(x-L) + i \bar{\varphi}_3} + e^{-\gamma(x-L) + i \bar{\varphi}_4} \right);$$

при  $x > L$ :

$$\psi_3(x) = A_1 \frac{\sqrt{2} p_1 \gamma \hbar}{\Delta_{II}} e^{i \frac{p_1}{\hbar} (x-L) + i \bar{\varphi}_5}.$$

Здесь  $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - p_1^2}$ .

Заметим, что амплитуды (4.44)–(4.47) при  $L \rightarrow \infty$  совпадают с амплитудами, полученными в задаче 4.2.

Рассмотрим количественный пример, положив для компьютерных расчетов  $A_1 = 1$ ,  $p_1 / \hbar = 1$ ,  $E_1 = 0,9U_0$  и  $L = 0,8\lambda_1 = 5\hbar / p_1$ . Тогда  $\gamma = 0,333$ . Из решений (4.44)–(4.47) получаем комплексные выражения для амплитуд:

$$A_2 = 0,758 - 0,610i, \quad A_3 = -0,037 + 0,058i,$$

$$A_4 = 1,795 - 0,668i, \quad A_5 = 0,144 + 0,178i$$

и находим действительные части волновых функций:

$$\operatorname{Re} \psi_1(x) = \operatorname{Re} \left[ A_1 e^{i p_1 x / \hbar} + A_2 e^{-i p_1 x / \hbar} \right] = 1,758 \cos x - 0,610 \sin x, \quad (4.52)$$

$$\operatorname{Re} \psi_2(x) = \operatorname{Re} \left[ A_3 e^{\gamma x} + A_4 e^{-\gamma x} \right] = -0,037 e^{0,333x} + 1,795 e^{-0,333x}, \quad (4.53)$$

$$\operatorname{Re} \psi_3(x) = \operatorname{Re} A_5 e^{i(p_1/\hbar)(x-L)} = 0,144 \cos(x-5) - 0,178 \sin(x-5). \quad (4.54)$$

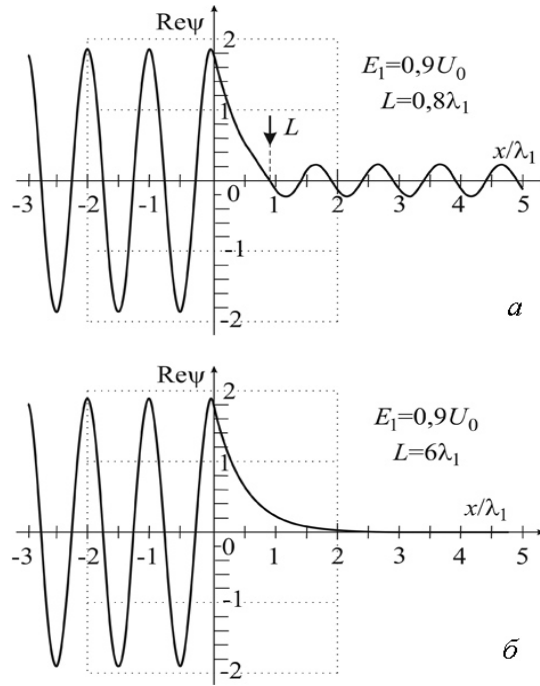


Рис. 4.10. Действительная часть волновой функции частицы, падающей на прямоугольный барьер в случае  $L = 0,8\lambda_1$  (а) и  $L = 6\lambda_1$  (б).

На рис.4.10 представлены зависимости действительных частей волновых функций  $\psi_1(x)$  для  $x < 0$ ,  $\psi_2(x)$  для  $0 < x < L$  и  $\psi_3(x)$  для  $x > L$  в двух случаях: при  $L = 0,8\lambda_1$  (см. формулы (4.52)–(4.54)) и для сравнения при  $L = 6\lambda_1$ .

Волновая функция быстро затухает в области широкого барьера  $L = 6\lambda_1$  (рис. 4.10 б) и практически не проникает в область 3.

Чем больше высота барьера («глубже» туннелирование частицы, меньше отношение  $E_1/U_0$ ), тем меньше амплитуда волновой функции в области 3 за барьером (сравните рис. 4.11 а и б).

**Ответ.** При прохождении над барьером:

$$\psi_1 = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_2 e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}}, \quad \psi_2(x) = A_3 e^{i \frac{p_2 x}{\hbar}} + A_4 e^{-i \frac{p_2 x}{\hbar}}, \quad \psi_3 = A_5 e^{i \frac{p_1}{\hbar}(x-L)},$$

где

$$p_2 = \sqrt{p_1^2 - 2mU_0}, \quad A_2 = A_1 \frac{2mU_0 \sin(p_2 L / \hbar)}{\Delta_1} e^{i\varphi_2},$$

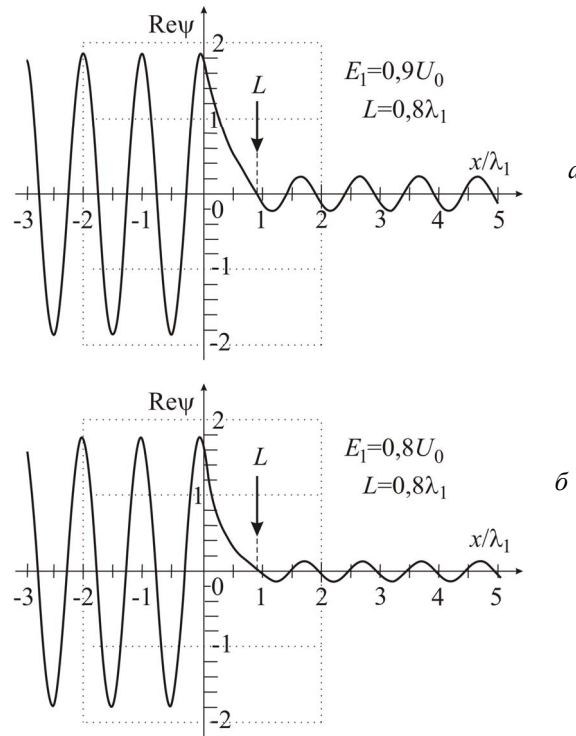


Рис. 4.11. Действительная часть волновой функции частицы, падающей на прямоугольный барьер  $L = 6\lambda_1$  в случае  $E_1 = 0,9U_0$  (а) и  $E_1 = 0,8U_0$  (б).

$$A_3 = A_1 \frac{p_1 [p_1 + p_2]}{\Delta_1} e^{i\varphi_3}, \quad A_4 = A_1 \frac{p_1 [p_1 - p_2]}{\Delta_1} e^{i\varphi_4}, \quad A_5 = A_1 \frac{2p_1 p_2}{\Delta_1} e^{i\varphi_5},$$

$$\Delta_1 = \sqrt{2} \sqrt{2p_1^4 - 4mU_0 p_1^2 + (mU_0)^2 - (mU_0)^2 \cos[2p_2 L / \hbar]},$$

$$\operatorname{tg} \varphi_2 = - \frac{p_1 p_2 \cdot \sin[2p_2 L / \hbar]}{\left[ p_1^2 - mU_0 \right] (1 - \cos[2p_2 L / \hbar])},$$

$$\operatorname{tg} \varphi_3 = - \frac{[p_1 - p_2]^2 \cdot \sin[2p_2 L / \hbar]}{[p_1 + p_2]^2 - [p_1 - p_2]^2 \cos[2p_2 L / \hbar]}, \quad \varphi_4 = \varphi_3 + 2p_2 L / \hbar,$$

$$\varphi_5 = \varphi_3 + p_2 L / \hbar.$$

При туннелировании под барьером:

$$\psi_1 = A_1 e^{i \frac{p_1 x}{\hbar}} + A_2 e^{-i \frac{p_1 x}{\hbar}}, \quad \psi_2(x) = A_3 e^{\gamma x} + A_4 e^{-\gamma x}, \quad \psi_3 = A_5 e^{i \frac{p_1}{\hbar}(x-L)},$$

где

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0 - p_1^2}, \quad A_2 = A_1 \frac{\sqrt{2} m U_0 \operatorname{Sh}(\gamma L)}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_2},$$

$$A_3 = A_1 \frac{\sqrt{2} p_1 m U_0 \exp(-\gamma L)}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_3}, \quad A_4 = A_1 \frac{\sqrt{2} p_1 m U_0 \exp(\gamma L)}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_4},$$

$$A_5 = A_1 \frac{\sqrt{2} p_1 \gamma \hbar}{\Delta_{II}} e^{i\bar{\varphi}_5},$$

$$\Delta_{II} = \sqrt{-2p_1^4 + 4p_1^2 m U_0 - (mU_0)^2 + (mU_0)^2 \operatorname{Ch}[2\gamma L]},$$

$$\operatorname{tg} \bar{\varphi}_2 = \frac{-p_1 \gamma (1 + \exp[2\gamma L / \hbar])}{mU_0 (1 - \exp[2\gamma L / \hbar])},$$

$$\operatorname{tg} \bar{\varphi}_3 = \frac{\gamma [mU_0 - (mU_0 - 2p_1^2) \exp[2\gamma L / \hbar]]}{p_1 [mU_0 + (3mU_0 - 2p_1^2) \exp[2\gamma L / \hbar]]},$$

$$\operatorname{tg} \bar{\varphi}_4 = \frac{\gamma [2p_1^2 - mU_0 + mU_0 \exp(2\gamma L / \hbar)]}{p_1 [2p_1^2 - 3mU_0 - mU_0 \exp(2\gamma L / \hbar)]}, \quad \bar{\varphi}_5 = \bar{\varphi}_2 + \frac{3\pi}{2}.$$

**Вопросы для самопроверки**

1. Почему в области 3 длина волны такая же, как в области 1, а амплитуда меньше? (*Ответ* см. в вопросах задачи 4.2)
2. Как изменяются волновые функции в областях 2 и 3 при увеличении разности  $U_0 - E_1$ ? (*Ответ*: см. рис. 4.11)
3. Как изменяется  $\text{Re}\psi$  при увеличении  $L$ ? (*Ответ*: см. рис. 4.10).

**4.3. Дискретный энергетический спектр****Задача 4.4 (Бесконечно глубокая яма. Дискретный спектр.)**

Часто в квантовой физике используется модель потенциальной энергии частицы в виде прямоугольной ямы конечной глубины. Нахождение собственных значений энергии и волновых функций в этом случае громоздко и вынесено в приложение 4.1. Рассмотрим предельный случай. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме, причем потенциальная энергия равна нулю в области  $-a < x < a$  (рис. 4.12). Найти волновые функции частицы и возможные значения энергии частицы. Масса частицы  $m$ .

**Решение.** Стационарное уравнение Шредингера

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

в области  $-a < x < a$ , где  $U(x) = 0$ , принимает вид

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \quad (4.55)$$

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  — модуль волнового вектора частицы.

Ограниченное (финитное) движение в данной области характеризуется дискретным энергетическим спектром. Собственные значения энергии и соответствующие им собственные волновые функции находим, решая уравнения (4.55).

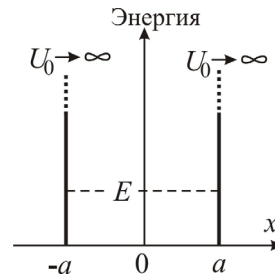


Рис. 4.12. Схема одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы.

Решение уравнения гармонических колебаний (4.55) может быть представлено в общем виде:

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx. \quad (4.56)$$

На границах (в точках  $x = \pm a$ ) волна де Бройля отражается от барьера, как в задаче 4.2 (случай II). Используя результаты задачи 4.2 (II) и учитывая, что барьер бесконечно высокий ( $U_0 \rightarrow +\infty$ ), получаем  $\gamma \gg p_1$ , а из (4.18) находим  $A_3 = A_1$  и  $A_2 \rightarrow 0$ .

Так как частица не может выйти за пределы бесконечной ямы, то условия непрерывности волновой функции в точках  $x = \pm a$  можно записать в виде

$$\psi(a) = 0, \quad (4.57)$$

$$\psi(-a) = 0. \quad (4.58)$$

Таким образом, в предельном случае  $U_0 \rightarrow +\infty$  достаточно воспользоваться условием (4.57), считая  $\psi = 0$  за барьером, и не накладывать дополнительного условия на  $\partial\psi/\partial x$  на границах ямы.

Подставляя в (4.57) и (4.58) волновую функцию (4.56), получаем систему уравнений

$$A \cos ka + B \sin ka = 0, \quad (4.59)$$

$$A \cos ka - B \sin ka = 0. \quad (4.60)$$

При решении системы (4.59) и (4.60) можно выделить два случая:

1. Если  $A \neq 0$ , а  $B = 0$ , то из уравнения  $\cos ka = 0$  следует, что волновые вектора могут принимать следующий дискретный ряд значений:

$$k_n a = \frac{\pi}{2}(2n+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.61)$$

когда на длине ямы  $2a$  укладывается нечетное число  $(2n+1)$  длин полуволен  $\lambda/2$ . В этом случае волновая функция является **четной**:

$$\psi_{\pm}(x) = A \cos \left[ \frac{\pi(2n+1)}{2a} x \right]. \quad (4.62)$$

Дискретные разрешенные значения энергии, соответствующие дискретным значениям волновых векторов:

$$E_n = \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2 (2n+1)^2 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2 j_{\div}^2, \quad (4.63)$$

где  $j_{\div} = 2n+1$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

2. Если  $B \neq 0$ , а  $A = 0$ , то из уравнения  $\sin ka = 0$  следует

$$k_n a = \frac{\pi}{2} (2n+2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.64)$$

то есть на длине ямы  $2a$  укладывается четное число  $2(n+1)$  длин полуволи  $\lambda/2$ . В этом случае волновая функция является **нечетной**:

$$\psi_{i \div}(x) = B \sin \left[ \frac{\pi(2n+2)}{2a} x \right]. \quad (4.65)$$

Разрешенные значения энергии:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n+1)^2 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2 (2n+2)^2 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2 j_{i \div}^2, \quad (4.66)$$

где  $j_{i \div} = 2n+2$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

Объединяя (4.63) и (4.66), получаем общую (как для четных, так и для нечетных волновых функций) формулу для энергетических уровней в бесконечно глубокой потенциальной яме:

$$E_j = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2 j^2.$$

Первые три энергетических уровня  $E_{0ч}$ ,  $E_{0нч}$  и  $E_{1ч}$  и соответствующие им волновые функции  $\psi_{0ч}(x)$ ,  $\psi_{0нч}(x)$  и  $\psi_{1ч}(x)$  (для  $j^2$ :  $1^2=1$ ,  $2^2=4$ ,  $3^2=9$ , см. (4.63) и (4.66)), изображены на рис. 4.13.

Для волновых функций дискретного спектра существует **осцилляционная теорема**, согласно которой функция  $\psi_n(x)$ , соответствующая  $(n+1)$ -му собственному значению энергии  $E_n$ , обращается в нуль  $n$  раз.

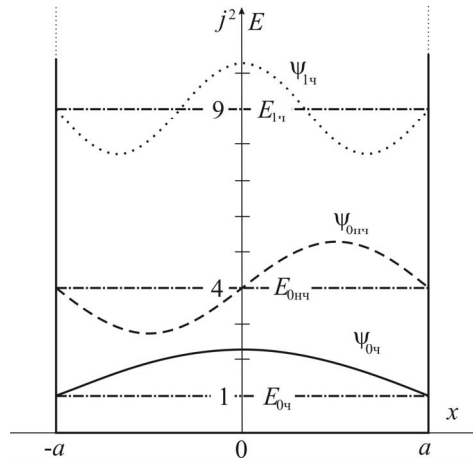


Рис. 4.13. Энергетические уровни и волновые функции (в фиксированный момент времени) частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме в области  $-a \leq x \leq a$ .

Волновая функция основного состояния с  $n = 0$  (соответствующая первому собственному значению энергии) не имеет узлов (точек обращения в нуль). Поэтому она не может быть нечетной

$\psi_{\text{нч}}(x) = B \sin\left[\frac{\pi}{a}x\right]$ , а может быть только четной:

$$\psi_0(x) = A \cos\left[\frac{\pi}{2a}x\right].$$

Энергия основного состояния равна  $E_0 = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2$ .

**Ответ.** Энергия имеет дискретные значения  $E_j = \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2 j^2$ ;

для четных волновых функций (на длине ямы укладывается нечетное число  $j = j_{\text{ч}} = 2n + 1$  полуволен)  $\psi_{\text{ч}}(x) = A \cos\left[\frac{\pi j_{\text{ч}}}{2a}x\right]$ ;

для нечетных волновых функций (на длине ямы укладывается четное число  $j = j_{\text{нч}} = 2n + 2$  полуволен)  $\psi_{\text{нч}}(x) = B \sin\left[\frac{\pi j_{\text{нч}}}{2a}x\right]$ ,

где  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Амплитуды  $A$  и  $B$  находятся из условия нормировки (найдите самостоятельно).



### Приложение 4.1. Дискретный энергетический спектр частицы в потенциальной яме конечной глубины и ширины

**Задача 4.5.** Найти возможные значения энергии и волновые функции частицы в потенциальной яме конечной глубины  $U_0 < 0$  и ширины  $2a$ , изображенной на рис. 4.14, при отрицательных значениях полной механической энергии  $E$  частицы:  $U_0 < E < 0$ . Расчет провести в частном случае  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar = 3,9$ . Масса частицы  $m$ .

**Решение.** Волновые функции, соответствующие дискретной части спектра при  $U_0 < E < 0$  в потенциальной яме  $U_0 < 0$  конечной глубины, изображенной на рис. 4.14, определены в ограниченной области пространства.

Внутри ямы ( $-a < x < a$ ) стационарное уравнение Шредингера имеет вид (4.55)

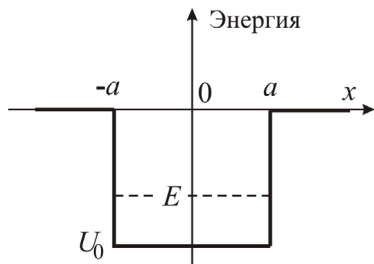


Рис. 4.14. Одномерная потенциальная яма конечной глубины.

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

и аналогичное (4.56) решение:

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx, \quad (4.67)$$

где

$$k = +\sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}. \quad (4.68)$$

Вне ямы ( $x < -a$  и  $x > a$ ) стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \gamma^2\psi = 0 \quad (4.69)$$

имеет решение

$$\psi = C e^{-\gamma x} \text{ при } x > a, \quad (4.70)$$

и

$$\psi = D e^{\gamma x} \text{ при } x < -a, \quad (4.71)$$

где

$$\gamma = +\sqrt{-2mE/\hbar^2}. \quad (4.72)$$

Из условия непрерывности функций  $\psi(x)$  (4.56), (4.70), (4.71) и их производных  $\partial\psi(x)/\partial x$  в точках  $x = \pm a$  получаем

при  $x = a$

$$A \cos ka + B \sin ka = C e^{-\alpha a}, \quad (4.73)$$

$$-kA \sin ka + kB \cos ka = -\gamma C e^{-\alpha a}; \quad (4.74)$$

при  $x = -a$

$$A \cos ka - B \sin ka = D e^{-\alpha a}, \quad (4.75)$$

$$kA \sin ka + kB \cos ka = \gamma D e^{-\alpha a}. \quad (4.76)$$

Преобразовав попарно уравнения (4.73), (4.75) и (4.74), (4.76), приходим к следующей системе уравнений:

$$2A \cos ka = (C + D) \exp(-\gamma a) \quad (4.77)$$

$$2kA \sin ka = \gamma (C + D) \exp(-\gamma a) \quad (4.78)$$

$$2B \sin ka = (C - D) \exp(-\gamma a) \quad (4.79)$$

$$2kB \cos ka = -\gamma (C - D) \exp(-\gamma a) \quad (4.80)$$

Введем безразмерные энергетические параметры:  $\xi = ak$  и  $\eta = \gamma a$ . Если возвести в квадрат и сложить уравнения (4.68) и (4.72), определяющие  $k$  и  $\gamma$ , то получим

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2}. \quad (4.81)$$

По условию задачи  $\xi^2 + \eta^2 = 2m|U_0|a^2/\hbar^2 = 3,9^2 = 15,21$ .

При решении системы (4.77)–(4.80) выделяем два случая.

Если  $A \neq 0$ ,  $B = 0$ ,  $C = D$ , то решение **четное** (см. (4.67)). Первые два уравнения системы (4.77)–(4.80) принимают вид

$$\cos \xi = \frac{C}{A} \exp(-\eta), \quad (4.82)$$

$$\sin \xi = \frac{\eta}{\xi} \frac{C}{A} \exp(-\eta). \quad (4.83)$$

Преобразуем систему (4.82), (4.83): 1) возведем в квадрат оба уравнения и сложим и 2) разделим уравнения друг на друга. В результате получаем систему:

$$C = \pm A \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^\eta = \pm A \frac{\xi}{3,9} e^\eta, \quad (4.84)$$

$$\operatorname{tg} \xi = \eta / \xi. \quad (4.85)$$

Волновая функция  $\psi_{\text{ч}}(x)$  четного решения (см.(4.67)–(4.72)) с учетом (4.84):

при  $-a < x < a$

$$\psi_{\text{ч}}(x) = A \cos(\xi x / a); \quad (4.86)$$

при  $x < -a$

$$\psi_{\text{ч}}(x) = D e^{\gamma x} = \pm A \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^{\eta(x/a+1)} = \pm A \frac{\xi}{3,9} e^{\eta(x/a+1)}; \quad (4.87)$$

при  $x > a$

$$\psi_{\text{ч}}(x) = C e^{-\gamma x} = \pm A \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^{-\eta(x/a-1)} = \pm A \frac{\xi}{3,9} e^{-\eta(x/a-1)}. \quad (4.88)$$

Знаки в (4.87) и (4.88) выбираются так, чтобы волновая функция была непрерывна в точках  $x = a$  и  $x = -a$ .

Итак, для нахождения значений  $\xi$  и  $\eta$  четного решения имеем систему уравнений (4.81) и (4.85):

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2}, \\ \eta = \xi \operatorname{tg} \xi. \end{cases} \quad (4.89)$$

Система (4.89) не решается аналитически в явном виде, но ее решение можно наглядно проанализировать графически (рис. 4.15).

Первому уравнению системы (4.89) соответствует кривая на плоскости  $(\xi, \eta)$ , представляющая собой четверть окружности с радиусом  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar$ . Кривые, соответствующие второму уравнению  $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$ , пересекают ось абсцисс в точках  $0, \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$

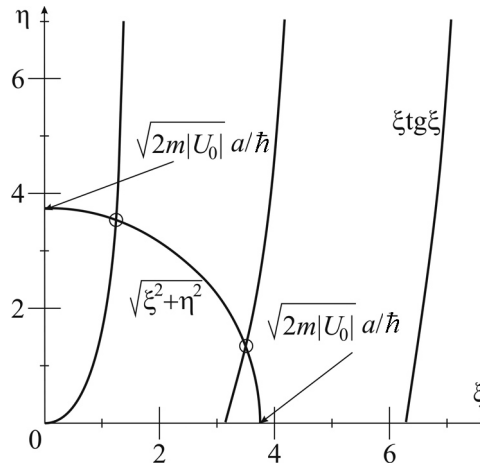


Рис. 4.15. Графический поиск четного решения  $\psi(x) = A \cos kx$  при  $-a < x < a$  системы уравнений (5.88); координаты точек, обведенных кружками:  $\xi_0 = 1,24569$ ,  $\eta_0 = 3,69571$  и  $\xi_1 = 3,56138$ ,  $\eta_1 = 1,58952$ .

Положим  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar = 3,9$ . В этом случае кривые, соответствующие функции  $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$  пересекают четверть окружности в двух точках ( $\xi_0 = 1,24569$ ,  $\eta_0 = 3,69571$ ) и ( $\xi_1 = 3,56138$ ,  $\eta_1 = 1,58952$ ), обведенных кружками на рис. 4.15. Значения  $\xi$  и  $\eta$  в этих точках являются решениями системы (4.89).

Таким образом, система (4.89) имеет конечное число корней  $(\xi_n, \eta_n)$ . По известным корням  $(\xi_n, \eta_n)$  системы (4.89) с помощью соотношений (4.68) (или (4.72)) можно определить собственные значения энергии  $E_n$ .

Для выбранного значения  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar = 3,9$  (рис. 4.15) точке с координатами  $(\xi_0, \eta_0)$  соответствует энергия  $E_{0ч} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \eta_0^2 \approx -13,7 \hbar^2 / (2ma^2)$ , точке с координатами  $(\xi_1, \eta_1)$  – энергия  $E_{1ч} = -\eta_1^2 \hbar^2 / (2ma^2) \approx -2,5 \hbar^2 / (2ma^2)$  (рис. 4.17).

Если  $A = 0$ ,  $B \neq 0$ ,  $D = -C$ , то имеет место **нечетное** решение (см. (4.67)). Используем уравнения (4.79), (4.80):

$$\sin \xi = \frac{C-D}{2B} \exp(-\eta), \quad (4.90)$$

$$\cos \xi = -\frac{\eta}{\xi} \frac{C-D}{2B} \exp(-\eta) \quad (4.91)$$

и преобразуем их аналогично (4.82) и (4.83) при нахождении четного решения. Получаем систему

$$C = \pm B \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^{\eta} = \pm B \frac{\xi}{3,9} e^{\eta}, \quad (4.92)$$

$$\operatorname{ctg} \xi = -\eta / \xi. \quad (4.93)$$

Волновая функция для нечетного решения с учетом (см.(4.67) – (4.72)) и (4.92):

при  $-a < x < a$

$$\psi_{i \div}(x) = B \sin kx = B \sin(\xi x / a); \quad (4.94)$$

при  $x < -a$

$$\psi_{i \div}(x) = D e^{\eta x} = \pm B \frac{-\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^{\eta(x/a+1)} = \pm B \frac{\xi}{3,9} e^{\eta(x/a+1)}; \quad (4.95)$$

при  $x > a$

$$\psi_{i \div}(x) = C e^{-\eta x} = \pm B \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^{-\eta(x/a-1)} = \pm B \frac{\xi}{3,9} e^{-\eta(x/a-1)}. \quad (4.96)$$

Для нечетного решения имеем систему, аналогичную системе (4.89):

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2}, \\ \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi, \end{cases} \quad (4.97)$$

это решение можно графически проанализировать с помощью рис. 4.16.

Кривые, соответствующие второму уравнению  $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$  системы (4.97), пересекают ось абсцисс в точках  $\pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \dots$

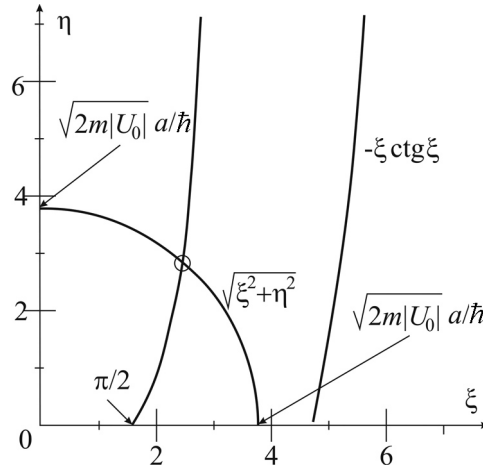


Рис. 4.16. Графический поиск нечетного решения  $\psi(x) = A \sin kx$  системы уравнений (5.96) при  $-a < x < a$  — координаты точки, обведенной кружком:  $\xi_0 = 2,45928$ ,  $\eta_0 = 3,02687$ .

Из анализа рис. 4.16 следует, что при  $0 < (2m|U_0|a^2)/\hbar^2 < (\pi/2)^2$ , т. е. при

$$0 < |U_0| < \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2},$$

нечетного решения не существует, есть только одно четное решение (соответствующее на рис. 4.15 точке пересечения окружности радиуса  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar < \pi/2$  и ближайшей к оси ординат кривой  $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$ ).

Для выбранного значения  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar = 3,9$  (рис. 4.16) точке с координатами  $\xi_0 = 2,45928$ ,  $\eta_0 = 3,02687$  соответствует энергия

$$E_{0\text{нч}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \eta_0^2 \approx -9,2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (\text{рис. 4.17}).$$

Изображенные на рис. 4.17 волновые функции (4.86)–(4.88) и (4.94)–(4.96) в состояниях с энергиями  $E_{0\text{ч}}$ ,  $E_{0\text{нч}}$  и  $E_{1\text{ч}}$  имеют вид:

С энергией  $E_{0ч}$

при  $-a < x < a$

$$\psi_{0ч}(x) = A \cos(\xi_0 x / a) \approx A \cos(1,2x/a); \quad (4.98)$$

при  $x < -a$

$$\psi_{0ч}(x) = A \frac{\xi_0}{\sqrt{\xi_0^2 + \eta_0^2}} e^{\eta_0(x/a+1)} \approx 0,32A e^{3,7(x/a+1)}; \quad (4.99)$$

при  $x > a$

$$\psi_{0ч}(x) = A \frac{\xi_0}{\sqrt{\xi_0^2 + \eta_0^2}} e^{-\eta_0(x/a-1)} \approx 0,32A e^{-3,7(x/a-1)}. \quad (4.100)$$

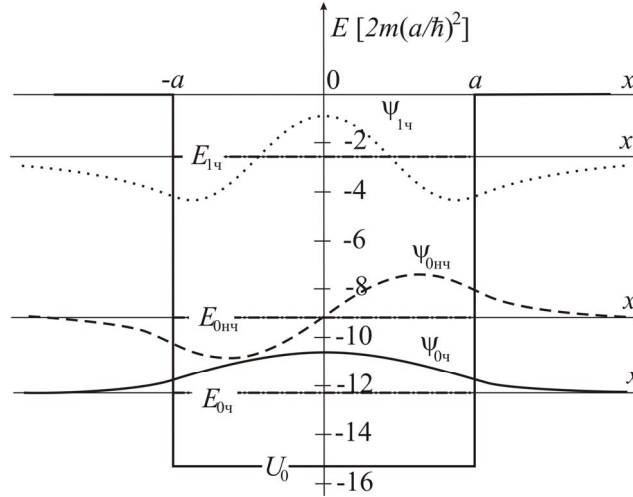


Рис. 4.17. В прямоугольной потенциальной яме ширины  $2a$  и глубины  $U_0 \approx -15,2\hbar^2/(2ma^2)$  имеются три состояния с энергиями (обозначены штрихпунктирными линиями):  $E_{0ч} \approx -13,7\hbar^2/(2ma^2)$ ,  $E_{0нч} \approx -9,2\hbar^2/(2ma^2)$  и  $E_{1ч} \approx -2,5\hbar^2/(2ma^2)$ . Волновые функции  $\psi_{0ч}(x)$ ,  $\psi_{0нч}(x)$  и  $\psi_{1ч}(x)$  в состояниях с указанными энергиями изображены соответственно сплошной, штриховой и пунктирной линиями. Этим состояниям на графиках рис. 4.15 и рис. 4.16 соответствуют точки, обведенные кружками.

С энергией  $E_{0нч}$

при  $-a < x < a$

$$\psi_{0нч}(x) = B \sin(\xi_0 x / a) \approx B \sin(2,5x/a), \quad (4.101)$$

при  $x < -a$

$$\psi_{0\text{нч}}(x) = B \frac{-\xi_0}{\sqrt{\xi_0^2 + \eta_0^2}} e^{\eta_0(x/a+1)} \approx -0,63Be^{3,0(x/a+1)}, \quad (4.102)$$

при  $x > a$

$$\psi_{0\text{нч}}(x) = B \frac{\xi_0}{\sqrt{\xi_0^2 + \eta_0^2}} e^{-\eta_0(x/a-1)} \approx 0,63Be^{-3,0(x/a-1)}. \quad (4.103)$$

С энергией  $E_{1\text{ч}}$

при  $-a < x < a$

$$\psi_{1\div}(x) = A \cos(\xi_1 x / a) \approx A \cos(3,6x/a) \approx A \cos[(\pi + 0,42)x/a]; \quad (4.104)$$

при  $x < -a$

$$\psi_{1\div}(x) = -A \frac{\xi_1}{\sqrt{\xi_1^2 + \eta_1^2}} e^{\eta_1(x/a+1)} \approx -0,91Ae^{1,6(x/a+1)}; \quad (4.105)$$

при  $x > a$

$$\psi_{1\div}(x) = -A \frac{\xi_1}{\sqrt{\xi_1^2 + \eta_1^2}} e^{-\eta_1(x/a-1)} \approx -0,91Ae^{-1,6(x/a-1)}. \quad (4.106)$$

**Ответ.** В состоянии с энергией  $E_{0\text{ч}} \approx -13,7\hbar^2/(2ma^2)$  волновая функция  $\psi_{0\text{ч}}(x) \approx A \cos(1,2x/a) \quad (-a < x < a)$ ,

$$\psi_{0\text{ч}}(x) \approx 0,32Ae^{3,7(x/a+1)} \quad (x < -a), \quad \psi_{0\text{ч}}(x) \approx 0,32Ae^{-3,7(x/a-1)}$$

$(x > a)$ ; в состоянии с энергией  $E_{0\text{нч}} \approx -9,2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ :

$$\psi_{0\text{нч}}(x) \approx B \sin(2,5x/a) \quad (-a < x < a), \quad \psi_{0\text{нч}}(x) \approx -0,63Be^{3,0(x/a+1)}$$

$(x < -a)$ ,  $\psi_{0\text{нч}}(x) \approx 0,63Be^{-3,0(x/a-1)} \quad (x > a)$ ; и в состоянии с энергией

$$E_{1\text{ч}} \approx -2,5 \frac{\hbar^2}{2ma^2}: \quad \psi_{1\text{ч}}(x) \approx A \cos(3,6x/a) \quad (-a < x < a),$$

$$\psi_{1\text{ч}}(x) \approx -0,91Ae^{1,6(x/a+1)} \quad (x < -a), \quad \psi_{1\text{ч}}(x) \approx -0,91Ae^{-1,6(x/a-1)}$$

$(x > a)$ .

**Задача 4.6. (Дискретный спектр. «Полубесконечная» яма.)**

Частица движется в «полубесконечной» яме:  $U \rightarrow \infty$  при  $x < 0$ ,



$U = U_0 < 0$  при  $0 < x < a$  и  $U = 0$  при  $x > a$  (рис. 5.18). Изобразите графически волновую функцию в основном состоянии. Определите допустимые значения энергии  $E_n$  дискретного спектра при значениях полной механической энергии  $U_0 < E < 0$ . При численных расчетах положите  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar = 3,9$ .

**Решение.** Внутри ямы ( $-a < x < a$ ) стационарное уравнение Шредингера имеет вид (4.55)

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

и аналогичное (4.556) решение:  $\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx$ , где

$$k = +\sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}. \quad (4.107)$$

Однако, поскольку при  $x = 0$ , аналогично задаче 4.4,  $\psi(0) = 0$  (для любых значений  $\partial\psi/\partial x$ ), то следует оставить **только нечетные функции**. Таким образом, внутри ямы ( $0 < x < a$ )

$$\psi(x) = B \sin kx. \quad (4.108)$$

Вне ямы ( $x > a$ ) стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \gamma^2\psi = 0$$

имеет решение

$$\psi(x) = C \exp(-\gamma x), \quad (4.109)$$

где

$$\gamma = +\sqrt{-2mE/\hbar^2}. \quad (4.110)$$

Из условия непрерывности  $\psi(x)$  (4.108), (4.109) и  $\partial\psi(x)/\partial x$  в точке  $x = a$  получаем

$$B \sin ka = C e^{-a\gamma}, \quad (4.111)$$

$$kB \cos ka = -\gamma C e^{-a\gamma}. \quad (4.112)$$

Введем безразмерные параметры:  $\xi = ak$  и  $\eta = \gamma a$ . Причем, как

и в предыдущей задаче,  $\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2} = 3,9^2$ .

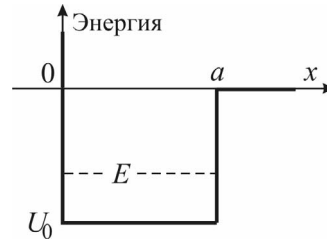


Рис. 4.18. Потенциальная энергия полубесконечной потенциальной ямы.

Уравнения системы (4.111)–(4.112) принимают вид

$$\sin \xi = \frac{C}{B} \exp(-\eta), \quad (4.113)$$

$$\cos \xi = -\frac{\eta}{\xi} \frac{C}{B} \exp(-\eta). \quad (4.114)$$

Преобразуем систему (4.113), (4.114): 1) возведем в квадрат оба уравнения и сложим и 2) разделим уравнения друг на друга. В результате получаем систему:

$$C = \pm B \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^{\eta} = \pm B \frac{\xi}{3,9} e^{\eta}, \quad (4.115)$$

$$\operatorname{ctg} \xi = -\eta / \xi. \quad (4.116)$$

Знак в (4.115) выбирается так, чтобы волновая функция была непрерывна в точке  $x = a$ .

Волновая функция для нечетного решения с учетом (4.115):

при  $-a < x < a$

$$\psi_{\text{нч}}(x) = B \sin kx = B \sin(\xi x / a); \quad (4.117)$$

при  $x > a$

$$\psi_{\text{нч}}(x) = C e^{-\gamma x} = \pm B \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} e^{-\eta(x/a-1)} = \pm B \frac{\xi}{3,9} e^{-\eta(x/a-1)}. \quad (4.118)$$

Значений  $\xi$  и  $\eta$  находим из системы уравнений (4.81) и (4.116):

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2m|U_0|a^2}{\hbar^2}, \\ \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi, \end{cases} \quad (4.119)$$

решение которой можно графически проанализировать с помощью рис. 4.16. При  $\sqrt{2m|U_0|}a / \hbar < \pi / 2$  в яме нет ни одного дискретного уровня энергии, т. е. нет стационарного локализованного состояния.

Для выбранного значения  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar = 3,9$  (рис. 4.16) точке с координатами  $\xi_0 = 2,45928$ ,  $\eta_0 = 3,02687$  соответствует энергия  $E_{0\text{нч}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\eta_0^2 \approx -9,2\frac{\hbar^2}{2ma^2}$  (рис. 4.19).

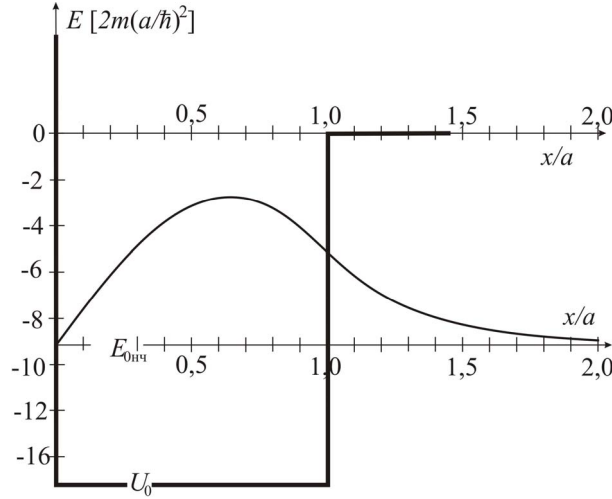


Рис. 4.19. В полубесконечной прямоугольной потенциальной яме ширины  $a$  и глубины  $U_0 \approx -15,2\hbar^2/(2ma^2)$  имеется только одно стационарное состояние с энергией  $E_{0\text{нч}} \approx -9,2\hbar^2/(2ma^2)$ . Волновая функция  $\psi_{0\text{нч}}(x)$  в этом состоянии простирается в область  $x > a$ .

Изображенная на рис. 4.19 волновая функция в состоянии с энергией  $E_{0\text{нч}} \approx -9,2\hbar^2/(2ma^2)$  имеет вид:

при  $-a < x < a$

$$\psi_{0\text{нч}}(x) = B \sin(\xi_0 x / a) \approx B \sin(2,5x / a), \quad (4.120)$$

при  $x > a$

$$\psi_{0\text{нч}}(x) = B \frac{\xi_0}{\sqrt{\xi_0^2 + \eta_0^2}} e^{-\eta_0(x/a-1)} \approx 0,63B e^{-3,0(x/a-1)}. \quad (4.121)$$

**Ответ.** При  $\sqrt{2|U_0|}ma/\hbar = 3,9$  (см. рис. 4.16) имеется одно локализованное состояние с энергией  $E_{0\text{нч}} \approx -9,2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$  и

$$\Psi_{0\text{нч}}(x) = \begin{cases} B \sin(\xi_0 x/a) \approx B \sin(2,5x/a) & (-a < x < a) \\ B \frac{\xi_0}{\sqrt{\xi_0^2 + \eta_0^2}} e^{-\eta_0(x/a-1)} \approx 0,63 B e^{-3,0(x/a-1)} & (x > a) \end{cases}$$

**Задание для самопроверки.** Сравните энергетические состояния частицы в прямоугольной бесконечной потенциальной яме (задача 5.4), в яме конечной глубины (задача 4.5) и в полубесконечной потенциальной яме (задача 4.6). Отсчет энергии ведите от дна потенциальной ямы. Ширину ямы положите равной  $\ell$ .

**Ответ.** Основное состояние:

в бесконечной потенциальной яме

$$E_0 \approx 2,46 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}, \quad E_1 \approx 9,8 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}, \quad E_2 \approx 22,1 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}$$

в яме конечной глубины

$$E_0 \approx (15,2 - 13,7) \frac{2\hbar^2}{m\ell^2} = 1,5 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}, \quad E_1 \approx 9,2 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}, \quad E_2 \approx 12,7 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}$$

в полубесконечной яме  $E_0 \approx (15,2 - 9,2) \frac{\hbar^2}{2ma^2} = 1,5 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}$ .

Сравнивая результаты, приходим к выводу, что для оценки глубоких энергетических состояний в яме конечной глубины можно пользоваться аналитическими формулами, полученными для бесконечной потенциальной ямы. Существенные расхождения появляются для состояний с энергиями, близкими к энергии дна потенциальной ямы  $U_0 \approx 15,21 \frac{2\hbar^2}{m\ell^2}$ .

## Приложение 4.2. Гармонический осциллятор

Полуклассическое рассмотрение энергетического спектра гармонического осциллятора на основе правил квантования (3.3) и (3.1) было сделано в задаче 3.11. Здесь предлагается решение на основе волновой механики (решение уравнения Шредингера).

**Задача 4.7.** Одномерный гармонический осциллятор — частица, имеющая положение устойчивого равновесия, из которого она может отклоняться в обе стороны вдоль оси  $OX$  под действием упругой силы, коэффициент упругости которой равен  $\beta$ . Масса частицы  $m$ . Найти допустимые значения энергии и волновые функции частицы (квантового гармонического осциллятора).

**Решение.** Круговая частота осциллятора  $\omega = \sqrt{\beta/m}$ . Потенциальная энергия частицы

$$U(x) = \frac{\beta x^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (\text{рис. 4.20}).$$

Полная механическая энергия гармонического осциллятора  $\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ .

Для квантового осциллятора записываем функцию Гамильтона

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (4.122)$$

и уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \Psi. \quad (4.123)$$

Состояния гармонического осциллятора дискретные, как и у квантовой частицы, находящейся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (см. задачу 4.4). Решение квантовой задачи сводится, таким образом, к отысканию собственных функций оператора  $\hat{H}$ , то есть решений уравнения

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n \cdot \psi_n(x), \quad (4.124)$$

ограниченных при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Собственные значения энергии  $\{E_n\}$  образуют энергетический спектр осциллятора.

Для удобства решения введем операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^\dagger$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (4.125)$$

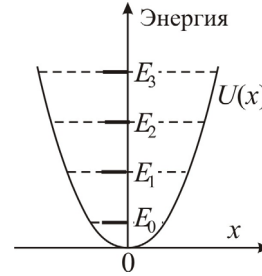


Рис. 4.20. Потенциальная энергия  $U(x)$  гармонического осциллятора.

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \frac{i\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (4.126)$$

Эти операторы обладают свойством, выражающимся уравнением

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1. \quad (4.127)$$

В этом случае оператор Гамильтона принимает вид:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.128)$$

Функция

$$\psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (4.129)$$

удовлетворяет уравнению

$$\hat{a}\psi_0(x) = 0, \quad (4.130)$$

так как  $\hat{a}\psi_0(x) = \frac{A_0}{\sqrt{2}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) = 0.$

Функция (4.129) является собственной функцией оператора Гамильтона  $\hat{H}$  (4.128). Энергия данного состояния  $\hbar\omega/2$ . Действительно

$$\hat{H}\psi_0(x) = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi_0(x) = \frac{1}{2} \hbar\omega \cdot \psi_0(x),$$

и

$$E_0 = \hbar\omega/2. \quad (4.131)$$

Состояние с энергией  $E_0 = \hbar\omega/2$  – основное состояние осциллятора. В этом состоянии осциллятор обладает минимальной энергией, соответствующей знаку равенства в соотношении неопределенностей.

Меньшие значения энергии осциллятора невозможны в соответствии с соотношениями неопределенностей Гейзенберга. Действительно, полная механическая энергия  $\hbar\omega/2$  гармонического осциллятора равна максимальному значению потенциальной энергии  $\beta x_m^2/2 = \hbar\omega/2$  и максимальному значению кинетической энергии  $p_m^2/(2m) = \hbar\omega/2$ . Величину  $x_m$  можно рассматривать как неопределенность координаты  $x_m = \delta x$ , а  $p_m$  — как неопределенность

импульса  $p_m = \delta p$ . Тогда для произведения получаем соотношение неопределенностей:

$$\delta x \cdot \delta p = \sqrt{m\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\beta}} = \hbar\omega \sqrt{\frac{m}{\beta}} = \hbar.$$

Волновые функции  $\psi_n(x)$  состояний с номерами  $n > 0$  получаются  $n$ -кратным действием оператора  $\hat{a}^\dagger$  на волновую функцию  $\psi_0(x)$  основного состояния:

$$\psi_n(x) = \underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \dots \hat{a}^\dagger}_n \psi_0(x) \equiv (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x). \quad (4.132)$$

Функция первого состояния

$$\psi_1(x) = \hat{a}^\dagger \psi_0(x) \quad (4.133)$$

является собственной функцией с энергией  $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ . Действительно, действуя оператором Гамильтона (4.128) на волновую функцию (4.133)

$$\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_1 = \left[ \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right] \psi_1 = \left[ \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right] \hat{a}^\dagger \psi_0 = \left[ \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger \right] \psi_0$$

и учитывая, что  $\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$  (4.127) и  $\hat{a}\psi_0(x) = 0$  (4.130), получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_1 &= \left[ \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger \right] \psi_0 = \left[ \hat{a}^\dagger (1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}) + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger \right] \psi_0 = \\ &= \frac{3}{2} \hat{a}^\dagger \psi_0 = \frac{3}{2} \psi_1. \end{aligned} \quad (4.134)$$

Докажем с использованием метода математической индукции, что волновая функция  $\psi_n(x)$  является собственной функцией состояния с энергией  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ .

Уже было показано, что для  $n = 0$

$$\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_0 = \frac{1}{2} \psi_0.$$

Теперь, пусть для некоторого  $n > 0$  справедливо равенство

$$\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \psi_n,$$

то есть

$$\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_n = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \psi_n. \quad (4.135)$$

Покажем, что оно верно и для  $n+1$ :

$$\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_{n+1} = \left(n+1 + \frac{1}{2}\right) \psi_{n+1}. \quad (4.136)$$

Действительно, поскольку  $\psi_{n+1} = \hat{a}^\dagger \psi_n$ , то

$$\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_{n+1} = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \hat{a}^\dagger \psi_n. \quad (4.137)$$

Преобразуем правую часть, используя (4.127) и (4.135):

$$\begin{aligned} \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \hat{a}^\dagger \psi_n &= \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger\right) \psi_n = \left(\hat{a}^\dagger (1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}) + \frac{1}{2} \hat{a}^\dagger\right) \psi_n = \\ &= \left[\hat{a}^\dagger \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \hat{a}^\dagger\right] \psi_n = \hat{a}^\dagger \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) \psi_n = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) \psi_{n+1}. \end{aligned} \quad (4.138)$$

Подставляя (4.138) в уравнение (4.137), окончательно получаем

$$\frac{1}{\hbar\omega} \hat{H}\psi_{n+1} = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) \psi_{n+1}, \quad (4.139)$$

что и требовалось доказать.

Таким образом, функции

$$\psi_n(x) = A_n \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (4.140)$$

являются собственными функциями оператора Гамильтона  $\hat{H}$  гармонического осциллятора с собственными значениями энергии

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \text{ при } n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.141)$$



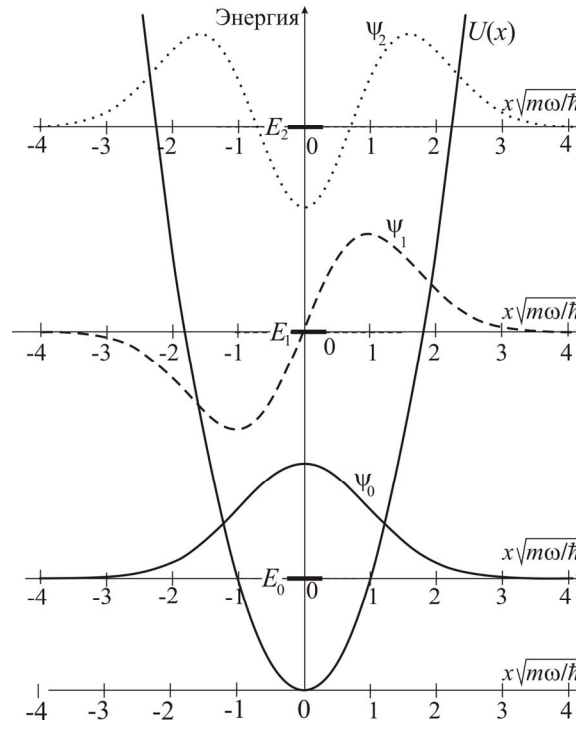


Рис. 4.21. Потенциальная энергия  $U_0(x)$  гармонического осциллятора, три уровня энергии  $E_0 = \hbar\omega/2$ ,  $E_1 = 3\hbar\omega/2$ ,  $E_2 = 5\hbar\omega/2$  и волновые функции  $\psi_0(x)$ ,  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$  в состояниях с указанными энергиями.

На рис. 4.21 изображены зависимости (от безразмерного параметра  $x\sqrt{m\omega/\hbar}$ ) потенциальной энергии частицы  $U(x)$  и волновых функций в трех состояниях с энергиями  $E_0 = \hbar\omega/2$ ,  $E_1 = 3\hbar\omega/2$  и  $E_2 = 5\hbar\omega/2$  соответственно:

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= A_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \\ \psi_1(x) &= \hat{a}^\dagger \psi_0(x) = \frac{A_0}{\sqrt{2}} \left( x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) = \\ &= A_0 \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \cdot x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_2(x) &= \hat{a}^\dagger \psi_1(x) = A_0 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right) x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) = \\ &= A_0 \left[ 2x^2 - \frac{\hbar}{m\omega} \right] \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).\end{aligned}$$

**Ответ.**  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ , при  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,

$$\psi_n(x) = A_n \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left( x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D4.1.** Получить выражение для волны де Бройля частицы, используя одномерное нестационарное уравнение Шредингера.

**Ответ.**  $\psi(x, t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} t - px \right)\right].$

**Задача D4.2.** Электрон находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме. Разность энергий электрона на первом ( $j_1 = 1$ ) или на пятом ( $j_2 = 5$ ) энергетических уровнях составляет  $\Delta E = 5 \text{ эВ}$ . Определить ширину ямы.

**Ответ.**  $\ell = \pi \hbar \sqrt{\frac{j_2^2 - j_1^2}{2m\Delta E}} = 1,1 \cdot 10^{-9} \text{ м}.$

**Задача 4.3.** Электрон находится в основном состоянии в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $2a$  ( $-a < x < a$ ). Рассчитать вероятность  $w$  обнаружения частицы в области  $-a < x < -a/3$ .

**Ответ.**  $w = \int_{-a}^{-a/3} \psi_1^2(x) dx = \int_{-a}^{-a/3} \frac{1}{a} \cos^2\left[\frac{\pi}{2a} x\right] dx = \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \approx 0,2.$

**Задача D4.4.** Максимальное значение плотности вероятности для частицы, находящейся в основном состоянии в одномерной

бесконечно глубокой потенциальной яме равно  $w_{\max}$ . Определить энергию частицы  $E$  и ширину ямы  $2a$ . Масса частицы  $m$ .

**Ответ.**  $E = \frac{(\pi \hbar w_{\max})^2}{8m}$ ;  $2a = \frac{2}{w_{\max}}$ .

**Задача D4.5.** Частица массой  $m$  находится в одномерной полубесконечной потенциальной яме, глубина которой равна  $U_0$ , а ширина  $a$ . При каком соотношении глубины и ширины ямы будут существовать три дискретных энергетических уровня?

**Ответ.**  $\sqrt{2m|U_0|}a/\hbar > 5\pi/2$ , то есть  $|U_0|a^2 > \frac{25\pi^2\hbar^2}{8m}$ .

**Задача D4.6.** Частица массой  $m$  находится в состоянии с минимальной энергией в потенциальной яме, имеющей ширину  $2a$  и конечную глубину. Волновая функция частицы на краях ямы в 2 раза меньше, чем в середине. Найти энергию данного состояния.

**Ответ.** Так как по условию задачи  $\xi/\sqrt{\xi^2 + \eta^2} = 1/2$  (см. (4.86) и (4.87)), то  $\xi = \pi/3$  и  $E = \frac{\pi^2\hbar^2}{18ma^2}$ .

**Задача D4.7.** Частица, двигающаяся по закону гармонического осциллятора, находится в основном состоянии в одномерном потенциальном поле  $U(x) = \beta x^2/2$ . Найти с помощью уравнения Шрёдингера энергию  $E$  и параметры  $A_0$  и  $\alpha$  волновой функции  $\psi_0(x) = A_0 \exp(-\alpha x^2)$  частицы. Масса частицы  $m$ .

**Ответ:**  $\alpha = \frac{\sqrt{\beta m}}{2\hbar}$ ,  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\beta/m}$ ,  $\psi_0(x) = A_0 \exp(-\alpha x^2) = \left(\frac{\sqrt{\beta m}}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\sqrt{\beta m}}{2\hbar}x^2\right]$ .

**Задача D4.8. (Потенциальная ступенька. Непрерывный спектр.)** Потенциальная энергия частицы имеет вид «ступеньки»:  $U = U_0$  при  $x < 0$  и  $U = 0$  при  $x > 0$  (см. рис. 4.22). Частица, движущаяся к ступеньке («падающая» на ступеньку) из области  $x \rightarrow -\infty$ ,

имеет импульс  $p_1$  и амплитуду  $A_1$  волновой функции. Найти волновую функцию частицы. Масса частицы  $m$ .

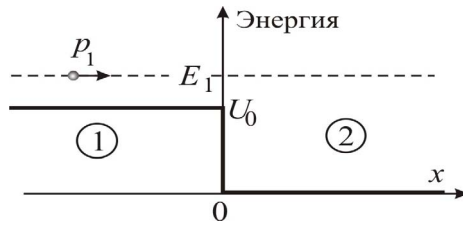


Рис.4.22. Зависимость потенциальной энергии частицы от координаты  $x$ .

**Ответ.**  $\psi_1(x) = A_1 e^{ip_1 x / \hbar} + A_1 \frac{1 - \sqrt{1 + 2mU_0 / p_1^2}}{1 + \sqrt{1 + 2mU_0 / p_1^2}} e^{-ip_1 x / \hbar}$  при

$$x \leq 0; \quad \psi_2(x) = \frac{2A_1}{1 + \sqrt{1 + 2mU_0 / p_1^2}} e^{ip_2 x / \hbar} \text{ при } x > 0,$$

где  $p_2 = \sqrt{p_1^2 + 2mU_0}$ .

## Глава 5

НАДБАРЬЕРНОЕ ПРОХОЖДЕНИЕ И ТУННЕЛЬНЫЙ  
ЭФФЕКТ В ОДНОМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ

## §5.1. Теоретическое введение

Как уже говорилось выше (см. (2.4)), квадрат модуля волновой функции  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  определяет **плотность вероятности** обнаружения частицы в момент времени  $t$  в точке с координатой  $\mathbf{r}$ . При движении частицы распределение в пространстве плотности вероятности изменяется и можно говорить о плотности *потока* вероятности. **Плотность потока вероятности** задается выражением

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*), \quad (5.1)$$

а в одномерном случае (вдоль оси  $OX$ ):

$$j_x = \frac{\hbar}{2im} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right). \quad (5.2)$$

Для волны де-Бройля  $\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp(-i\omega t + i\mathbf{k}\mathbf{r})$  плотность потока вероятности

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] = \frac{\hbar}{2im} [2i\mathbf{k}|A|^2] = \mathbf{v}|A|^2, \quad (5.3)$$

т. е. равна скорости  $\mathbf{v}$  движения частицы, умноженной на квадрат модуля амплитуды  $|A|^2$ .

Для частицы, волновая функция которой представляет собой волновой пакет (§2.2), плотность потока вероятности равна плотности вероятности обнаружения частицы  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ , умноженной на скорость распространения максимума волнового пакета (скорость перемещения частицы).

Сохранение полной вероятности описывается уравнением сохранения потока:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \text{div } \mathbf{j} = 0. \quad (5.4)$$

(аналог уравнения неразрывности в гидромеханике – закона сохранения массы для движущейся жидкости  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$ )

Ограничимся рассмотрением только **одномерных стационарных задач**.

В **стационарных** задачах ( $\partial U / \partial t = 0$ ) энергия квантовой частицы, как и классической, сохраняется. В этом случае  $\partial \rho / \partial t = 0$  и в одномерном случае уравнение (5.4) приобретает вид

$$\frac{\partial j_x}{\partial x} = 0, \quad j_x = \text{const}, \quad (5.5)$$

т. е. плотность потока вероятности не изменяется.

**Задача 5.1.** Убедитесь, что плотность потока вероятности равна нулю ( $j_x = 0$ ) как для частицы, находящейся в бесконечной потенциальной яме (задача 4.4), так и для частицы, движущейся к ступенчатому барьеру с энергией  $E_1$ , меньшей высоты барьера:  $E_1 < U_0$  (задача 4.2 (случай II)).

**Решение.** Для потенциальной ямы с бесконечными стенками четные и нечетные решения имеют вид (4.62) и (4.65):

$$\begin{aligned} \psi_{\text{ч}}(x) &= A \cos k_n x = \frac{A}{2} (e^{ik_n x} + e^{-ik_n x}), \\ \psi_{\text{нч}}(x) &= A \sin k_n x = \frac{A}{2i} (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}). \end{aligned}$$

Подставляя эти волновые функции в уравнение  $j_x = \frac{\hbar}{2im} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$  (5.2), убеждаемся что  $j_x = 0$ .

В данном случае частица обладает дискретным спектром, ее волновые функции представляют собой стоячие волны, скорость распространения которых равна нулю. Поэтому поток вероятности (поток частиц) отсутствует.

Аналогично, используя волновые функции (см. ответ задачи 4.2 (случай II)):

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{ip_1 x / \hbar} + A_1 e^{-i(p_1 x / \hbar + \varphi_2)} \quad \text{при } x < 0 \text{ и} \\ \psi_2(x) &= \frac{2A_1}{\sqrt{1 + (\gamma \hbar / p_1)^2}} e^{-\gamma x - i\varphi_1} \quad \text{при } x > 0, \end{aligned}$$

убеждаемся, что и для частицы, движущейся к ступенчатому барьеру с энергией  $E_1 < U_0$ ,  $j_x = 0$ . Это означает, что поток частиц с энергией, меньше, чем высота барьера, отсутствует.

### §5.2. Надбарьерное отражение и прохождение

**Задача 5.2.** Квантовая частица движется в потенциальном поле в виде одномерной ступеньки (см. условия задачи 4.2 (случай I)) из области  $x \rightarrow -\infty$ . Энергия частицы  $E_1$  больше высоты ступеньки  $U_0$ . Амплитуда падающей на ступеньку волны  $A_1$ . Найти плотность потока вероятности и коэффициенты отражения  $R$  и прохождения  $D$ . Масса частицы  $m$ .

**Коэффициент прохождения** равен отношению плотности потока вероятности прошедшей волны к плотности потока вероятности падающей волны:

$$D = j_{\text{прош}} / j_{\text{пад}}, \quad (5.6)$$

а **коэффициент отражения** равен отношению плотности потока вероятности отраженной волны к плотности потока вероятности падающей волны:

$$R = j_{\text{отр}} / j_{\text{пад}}. \quad (5.7)$$

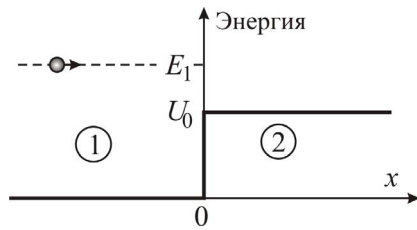


Рис. 5.1. Потенциальная энергия в виде ступеньки для частицы, движущейся с энергией  $E_1 > U_0$ .

**Решение.** Полученные в задаче 4.2 (I) волновые функции (4.7) и (4.8):  $\psi_1(x) = A_1 e^{ip_1 x/\hbar} + A_3 e^{-ip_1 x/\hbar}$  при  $x < 0$  и  $\psi_2 = A_2 e^{ip_2 x/\hbar}$  при  $x > 0$ , подставляем в формулу (5.2) для плотности потока вероятности, получаем

при  $x < 0$  (область 1 на рис. 5.1)

$$(j_x)_1 = \frac{p_1}{m} (|A_1|^2 - |A_3|^2), \quad (5.8)$$

при  $x > 0$  (область 2 на рис.5.1)

$$(j_x)_2 = \frac{p_2}{m} |A_2|^2. \quad (5.9)$$

С учетом выражений для амплитуд  $A_2 = \frac{2A_1 p_1}{p_1 + p_2}$  и  $A_3 = A_1 \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2}$  (4.12), где  $p_1 = \sqrt{2mE_1}$ ,  $p_2 = \sqrt{2m(E_1 - U_0)}$ , убеждаемся, что

$$(j_x)_1 = (j_x)_2 = \frac{4A_1^2 E_1 \sqrt{2(E_1 - U_0)}}{\sqrt{m} (\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0})^2}, \quad (5.10)$$

то есть полный поток отличен от нуля и сохраняется, в том числе и в точке скачка потенциальной энергии  $U(x)$  при  $x = 0$ . Заметим, что величина плотности потока зависит от разности  $(E_1 - U_0)$  и обращается в нуль при  $E_1 = U_0$ , когда кинетическая энергия частицы равна высоте потенциальной ступеньки.

Для вычисления коэффициентов отражения и прохождения запишем отдельно плотности потока падающей, отраженной и прошедшей волн.

Поток вероятности падающей волны де Бройля

$$(j_x)_{\text{пад}} = \frac{p_1}{m} |A_1|^2 = A_1^2 \sqrt{\frac{2E_1}{m}} \quad (5.11)$$

разделяется на поток, связанный с отраженной волной:

$$(j_x)_{\text{отр}} = -\frac{p_1}{m} |A_3|^2 = -A_1^2 \sqrt{\frac{2E_1}{m}} \left[ \frac{\sqrt{E_1} - \sqrt{E_1 - U_0}}{\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0}} \right]^2, \quad (5.12)$$

и поток, связанный с прошедшей волной:

$$(j_x)_{\text{прош}} = \frac{p_2}{m} |A_2|^2 = A_1^2 \sqrt{\frac{2E_1}{m}} \frac{4\sqrt{E_1(E_1 - U_0)}}{[\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0}]^2}, \quad (5.13)$$

так что

$$(j_x)_{\text{пад}} = |(j_x)_{\text{отр}}| + (j_x)_{\text{прош}}. \quad (5.14)$$



По определению коэффициентов прохождения (5.6) и отражения (5.7) с учетом полученных для плотностей потока выражений (5.11)–(5.13) находим

$$D = \frac{4\sqrt{E_1(E_1 - U_0)}}{(\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0})^2}, \quad R = \left[ \frac{\sqrt{E_1} - \sqrt{E_1 - U_0}}{\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0}} \right]^2 \quad (5.15)$$

и

$$D + R = 1.$$

Коэффициенты прохождения и отражения в зависимости от безразмерного параметра  $\chi = E_1 / U_0$  имеют вид:

$$D = \frac{4\sqrt{\chi(\chi - 1)}}{(\sqrt{\chi} + \sqrt{\chi - 1})^2}, \quad R = \left[ \frac{\sqrt{\chi} - \sqrt{\chi - 1}}{\sqrt{\chi} + \sqrt{\chi - 1}} \right]^2 \quad (5.16)$$

и представлены на рис. 5.2.

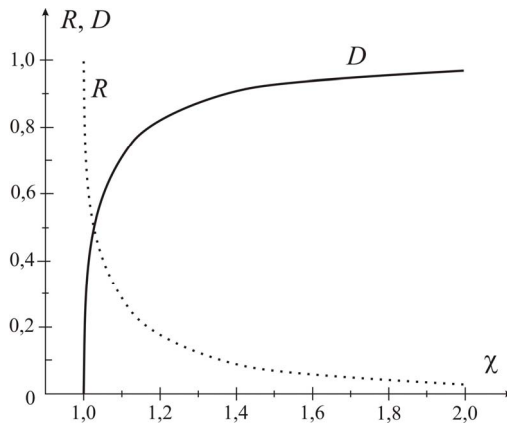


Рис. 5.2. Зависимости коэффициентов прохождения  $D(\chi)$  и отражения  $R(\chi)$  от безразмерного параметра  $\chi = E_1 / U_0$  при падении частицы на ступенчатый барьер с энергией больше высоты барьера.

**Ответ:**  $(j_x)_1 = (j_x)_2 = \frac{4A_1^2 E_1 \sqrt{2(E_1 - U_0)}}{\sqrt{m} (\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0})^2},$

$$D = \frac{4\sqrt{E_1(E_1 - U_0)}}{(\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0})^2}, \quad R = \frac{(\sqrt{E_1} - \sqrt{E_1 - U_0})^2}{(\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - U_0})^2}.$$

**Задача 5.3.** Найти коэффициенты прохождения и отражения для волны де Бройля, падающей на прямоугольный потенциальный барьер. Параметры барьера указаны на рис. 5.3. Энергия частицы  $E_1$  больше высоты потенциального барьера  $U_0$ . Масса частицы  $m$ .

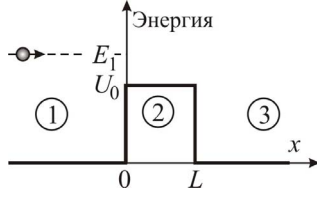


Рис. 5.3. Частица движется к прямоугольному потенциальному барьеру. Кинетическая энергия частицы в области 1  $E_1 > U_0$ .

**Решение.** Используем полученные в задаче 4.3 (случай I) значения амплитуд  $A_2$  (4.32) и  $A_5$  (4.35) и находим выражения для коэффициента прохождения:

$$D = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 = \left[ \frac{A_5}{A_1} \right] \left[ \frac{A_5}{A_1} \right]^* = \left[ \frac{2p_1 p_2}{\Delta_1} \right]^2 = \frac{2(p_1 p_2)^2}{2p_1^4 - 4mU_0 p_1^2 + (mU_0)^2 - (mU_0)^2 \cos[2p_2 L / \hbar]} \quad (5.17)$$

и для коэффициента отражения:

$$R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = \left[ \frac{A_2}{A_1} \right] \left[ \frac{A_2}{A_1} \right]^* = \left[ \frac{2mU_0 \sin[p_2 L / \hbar]}{\Delta_1} \right]^2 = \frac{2(mU_0)^2 \sin^2[p_2 L / \hbar]}{2p_1^4 - 4mU_0 p_1^2 + (mU_0)^2 - (mU_0)^2 \cos[2p_2 L / \hbar]}. \quad (5.18)$$

Учитывая, что  $p_1^2 = 2mE_1$ , а  $p_2^2 = 2m(E_1 - U_0)$ , полученные выражения (5.17) и (5.18) для коэффициентов прохождения и отражения перепишем в виде:

$$D = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 = \frac{8E_1(E_1 - U_0)}{8E_1^2 - 8U_0E_1 + U_0^2 - U_0^2 \cos\left[2L\sqrt{2m(E_1 - U_0)} / \hbar\right]}, \quad (5.19)$$

$$R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = 1 - \frac{8E_1(E_1 - U_0)}{8E_1^2 - 8U_0E_1 + U_0^2 - U_0^2 \cos\left[2L\sqrt{2m(E_1 - U_0)} / \hbar\right]}. \quad (5.20)$$

Очевидно, что имеет место баланс потоков:  $R + D = 1$ .

Проанализируем зависимости коэффициентов надбарьерного прохождения  $D$  (5.19) и отражения  $R$  (5.20) от энергии падающей частицы  $E_1$  и от ширины барьера  $L$ .

Коэффициенты прохождения и отражения в зависимости от безразмерного параметра  $\chi = E_1 / U_0$  имеют вид:

$$D = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 = \frac{8\chi(\chi-1)}{8\chi^2 - 8\chi + 1 - \cos \left[ 2L\sqrt{2mU_0(\chi-1)} / \hbar \right]}, \quad (5.21)$$

$$R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = 1 - \frac{8\chi(\chi-1)}{8\chi^2 - 8\chi + 1 - \cos \left[ 2L\sqrt{2mU_0(\chi-1)} / \hbar \right]}. \quad (5.22)$$

Зависимость  $D(\chi)$ , рассчитанная при фиксированных значениях ширины  $L_1$  и высоты  $U_{01}$  барьера ( $L_1 / \hbar = 32$  и  $2mU_{01} = 1$ ), представлена на рис. 5.4.

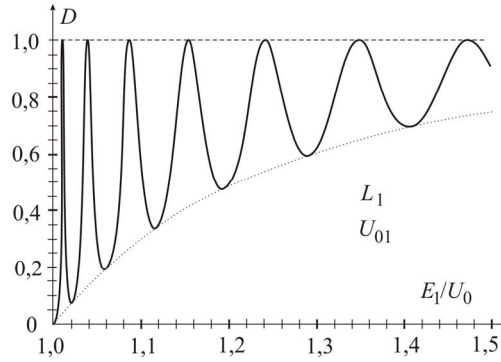


Рис. 5.4. Зависимость коэффициента прохождения  $D$  от безразмерного энергетического параметра  $\chi = E_1 / U_0$ , где  $E_1$  — энергия падающей на барьер частицы.

График  $D(\chi)$  имеет осциллирующий характер при  $E_1 > U_0$  (рис. 5.4). Заметим, что при  $E_1 / U_0 = 1$  коэффициент прохождения отличен от нуля:  $D = 0,004 > 0$  (сравните с движением

частицы в потенциальном поле в виде ступеньки при том же условии  $E_1 = U_0$ ).

Коэффициент прохождения достигает **локального максимума**  $D=1$ , если

$$\cos\left(2L\sqrt{2m(E_1 - U_0)}/\hbar\right) = 1, \quad (5.23)$$

то есть при значениях энергии падающей частицы, удовлетворяющих соотношению

$$E_{1n} = U_0 + \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar n}{L} \right)^2, \text{ где } n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.24)$$

При значениях энергии

$$E'_{1n} = U_0 + \frac{1}{2m} \left( \frac{\pi \hbar (n + 1/2)}{L} \right)^2, \text{ где } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.25)$$

когда

$$\cos\left(2L/\hbar\sqrt{2m(E'_{1n} - U_0)}\right) = -1, \quad (5.26)$$

коэффициент прохождения  $D$  достигает **локального минимума**, равного

$$D_n = \frac{8E'_{1n}(E'_{1n} - U_0)}{8E'^2_{1n} - 8U_0E'_{1n} + 2U_0^2} = \frac{8\chi'_n(\chi'_n - 1)}{8\chi'^2_n - 8\chi'_n + 2}, \quad (5.27)$$

где  $\chi'_n = E'_{1n}/U_0$ .

Все максимумы соответствуют  $D=1$ , а локальные минимумы (5.25) лежат на гладкой плавной кривой (рис. 5.4), соответствующей формуле (5.27).

Наличие локальных минимумов и максимумов зависимости  $D(E_1)$  связано с **резонансным характером взаимодействия** волны де Бройля с потенциальным барьером. Действительно, учитывая, что импульс в области 2 равен  $p_2 = \sqrt{2m(E_1 - U_0)} = 2\pi\hbar/\lambda_2$ , условие максимумов (5.24) можно записать в виде

$$L_{\max} = \frac{\lambda_2}{2} n. \quad (5.28)$$

Таким образом, максимум коэффициента прохождения, соответствующий полному прохождению ( $D = 1$ ), наблюдается тогда, когда в области барьера укладывается целое число половин длины волны (или четное число четвертей длины волны) (5.28).

Из условия (5.25) следует

$$L_{\min} = \frac{\lambda_2}{4}(2n+1), \quad (5.29)$$

то есть минимум коэффициента прохождения наблюдается, когда на длине барьера укладывается нечетное число четвертей длины волны.

### Вопросы для самопроверки

1. Как изменится зависимость на рис. 5.4 при увеличении ширины потенциального барьера в два раза?

2. Как изменится зависимость на рис. 5.4 при увеличении (или уменьшении) высоты потенциального барьера?

**Ответы.** 1. Чем шире барьер, тем чаще на одном и том же интервале энергии выполняется условие резонанса (5.24) (см. рис. 5.5).

2. В соответствии с (5.24), изменение высоты барьера приводит к одинаковому сдвигу резонансных значений энергии (см. рис. 5.6).

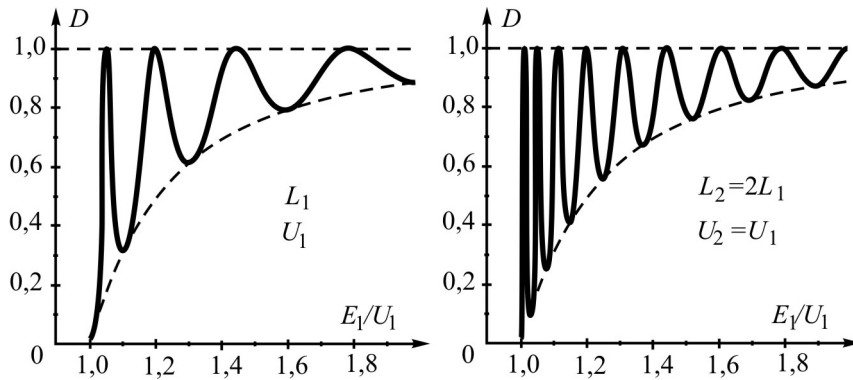
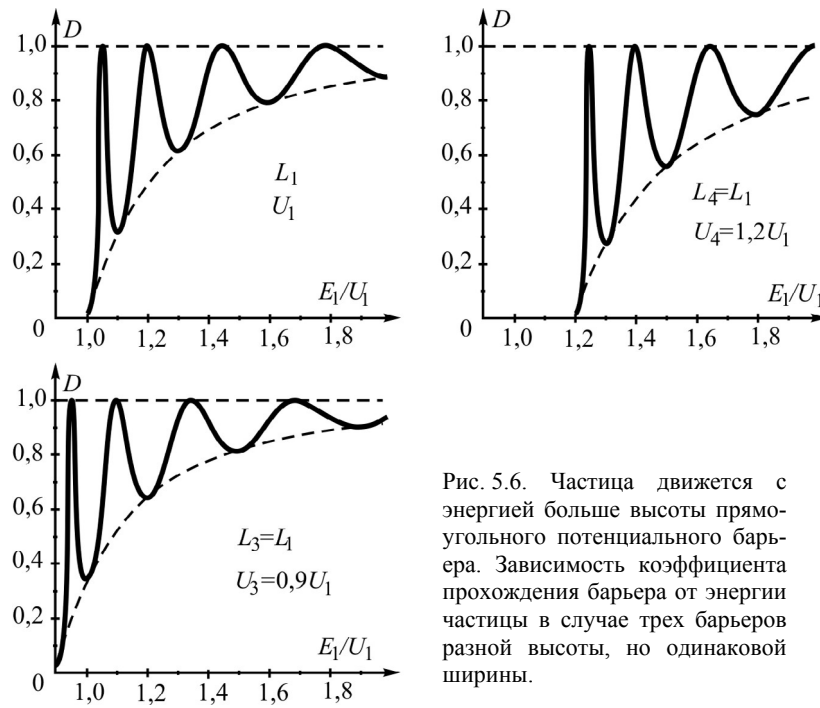
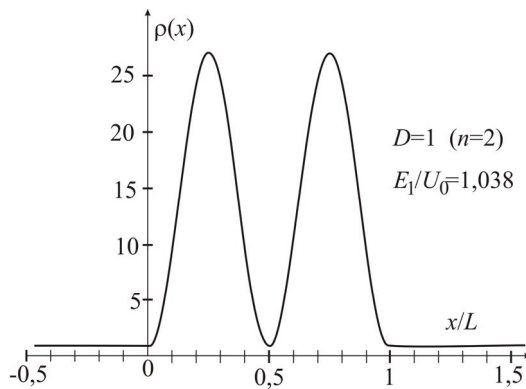


Рис. 5.5. Частица движется с энергией больше высоты прямоугольного потенциального барьера. Зависимость коэффициента прохождения барьера от энергии частицы для двух барьеров одинаковой высоты, но разной ширины.



Зависимость от  $x$  плотности вероятности обнаружения частицы в точке с координатой  $x$  в случае полного прохождения ( $D=1$ ) представлена на рис. 5.7 (для  $n=2$ ,  $E_1=1,038 U_0$ , при расчетах полагалось, что  $L/\hbar=32$ ,  $2mU_0=1$ ).



**Вопрос.** Почему плотность вероятности  $\rho(x) = |\psi(x)|^2$  имеет значения больше единицы (см. рис. 5.7)?

**Ответ.** Рассматриваемая в задаче волна де-Бройля  $\psi_1' = A_1 \exp(i p_1 x / \hbar)$  (4.22), попадающая в область потенциального барьера, не нормирована. В результате не нормированной становится и результирующая волновая функция  $(\psi_1(x < 0) + \psi_2(0 < x < L) + \psi_3(x > L))$  ((4.22)–(4.24)). Поэтому физический смысл имеет не абсолютное значение плотности вероятности, а сравнение плотностей вероятности в разных точках.

Падающая  $\psi_1$  и прошедшая  $\psi_3$  бегущие волны (см. рис. 5.7) имеют одинаковую амплитуду (так как  $\rho$  одинаковые), а внутри потенциального барьера волна подобна стоячей волне, амплитуда которой в  $\sim 5$  раз больше, а амплитуда плотности больше в  $\sim 25$  раз! Частица как бы «останавливается» над барьером.

Плотность вероятности обнаружения частицы в точке с координатой  $x$  в случае локального минимума прохождения  $D = 0,0096 \ll 1$  (максимального надбарьерного отражения) представлена на рис. 6.8 (при  $n = 0$   $E_0' = 1,0024 U_0$ , и  $L / \hbar = 32$ ).

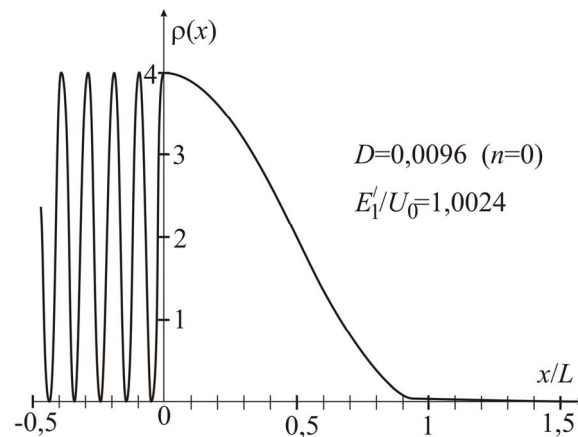


Рис. 5.8. Зависимость плотности вероятности  $\rho(x) = |\psi(x)|^2$  от координаты  $x$  частицы в случае минимального прохождения ( $D = 0,0096$  при  $E_1' = 1,0024 U_0$  ((5.25) при  $n = 0$ ).

При  $x < 0$ , волна имеет форму, близкую к стоячей. Она образована наложением падающей и отраженной волн с практически

одинаковыми амплитудами ( $A \approx 1$ ) и бегущей волны с очень маленькой амплитудой ( $A = 0,0096$ ).

Запишем формулы (5.21) и (5.22) для коэффициентов прохождения и отражения в области 2 через длину волны  $\lambda_2$  ( $p_2 = \sqrt{2mU_0(\chi-1)}$ , а  $\lambda_2 = 2\pi\hbar/\sqrt{2mU_0(\chi-1)}$ ):

$$D = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 = \frac{8\chi(\chi-1)}{8\chi^2 - 8\chi + 1 - \cos[4\pi L/\lambda_2]}, \quad (5.30)$$

$$R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = 1 - \frac{8\chi(\chi-1)}{8\chi^2 - 8\chi + 1 - \cos[4\pi L/\lambda_2]}. \quad (5.31)$$

Зависимости коэффициентов  $D$  (5.30) и  $R$  (5.31) от  $L/\lambda_2$  (толщины барьера в единицах длины волны  $\lambda_2$ ) изображены на рис. 5.9.

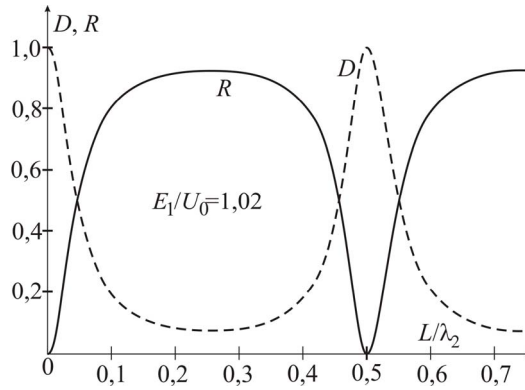


Рис. 5.9. Зависимость коэффициентов прохождения  $D$  и отражения  $R$  от толщины барьера  $L$  ( $\lambda_2$  – длина волны частицы в области барьера).

В соответствии с формулами (5.30) и (5.31) рис. 5.9 демонстрирует периодический характер зависимостей коэффициентов  $D$  и  $R$  от толщины барьера.

**Ответ.**

$$D = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 = \frac{8E_1(E_1 - U_0)}{8E_1^2 - 8U_0E_1 + U_0^2 - U_0^2 \cos\left[2L\sqrt{2m(E_1 - U_0)}/\hbar\right]},$$



$$R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = 1 - \frac{8E_1(E_1 - U_0)}{8E_1^2 - 8U_0E_1 + U_0^2 - U_0^2 \cos \left[ 2L\sqrt{2m(E_1 - U_0)} / \hbar \right]}.$$

### §5.3. Туннельный эффект: подбарьерное прохождение

**Задача 5.4. (Туннельный эффект для прямоугольного барьера.)** Найти коэффициенты прохождения и отражения волны де Бройля, падающей на прямоугольный потенциальный барьер (параметры барьера см. на рис. 4.9 задачи 4.3 (случай II)) при  $E_1 < U_0$ .

**Решение.** Аналогично решению задачи 5.3, воспользуемся результатами решения задачи 4.3(II). Значения коэффициентов прохождения  $D = |A_5 / A_1|^2$  и отражения  $R = |A_2 / A_1|^2$  находим, используя формулы (4.48) и (4.51).

Коэффициент прохождения

$$\begin{aligned} D = \left| \frac{A_5}{A_1} \right|^2 &= \left[ \frac{A_5}{A_1} \right] \left[ \frac{A_5}{A_1} \right]^* = \\ &= \frac{2p_1^2 (2mU_0 - p_1^2)}{-2p_1^4 + 4p_1^2 mU_0 - (mU_0)^2 + (mU_0)^2 \operatorname{ch} \left[ \sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar \right]} \quad (5.32) \end{aligned}$$

и коэффициент отражения

$$\begin{aligned} R = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 &= \left[ \frac{A_2}{A_1} \right] \left[ \frac{A_2}{A_1} \right]^* = \\ &= \frac{2(mU_0)^2 \operatorname{sh} \left[ \sqrt{2mU_0 - p_1^2} L / \hbar \right]}{-2p_1^4 + 4p_1^2 mU_0 - (mU_0)^2 + (mU_0)^2 \operatorname{ch} \left[ \sqrt{2mU_0 - p_1^2} 2L / \hbar \right]}. \quad (5.33) \end{aligned}$$

Учитывая, что  $p_1^2 = 2mE_1$ , запишем полученные выражения для коэффициентов через энергию  $E_1$  частицы:

$$D = \frac{8E_1(U_0 - E_1)}{8U_0E_1 - 8E_1^2 - U_0^2 + U_0^2 \operatorname{ch} \left( 2L\sqrt{2m(U_0 - E_1)} / \hbar \right)}, \quad (5.34)$$

$$R = 1 - \frac{8E_1(U_0 - E_1)}{8U_0E_1 - 8E_1^2 - U_0^2 + U_0^2 \operatorname{ch}\left(2L\sqrt{2m(U_0 - E_1)/\hbar}\right)}, \quad (5.35)$$

Сравнивая (5.34) и (5.35), убеждаемся в наличии баланса потоков:  $R + D = 1$ . Заметим, что формулы (6.34) и (6.35) отличаются от формул (5.19) и (5.20) лишь заменой обычного косинуса на гиперболический.

Зависимость (5.34) коэффициента прохождения от отношения  $\chi = E_1/U_0$

$$D = \frac{8\chi(1-\chi)}{8\chi - 8\chi^2 - 1 + \operatorname{ch}\left(2L\sqrt{2mU_0(1-\chi)/\hbar}\right)} \quad (5.36)$$

представлена на рис. 5.10 (при компьютерных расчетах полагалось  $2mU_0 = 1$  и  $L/\hbar = 3$ ).

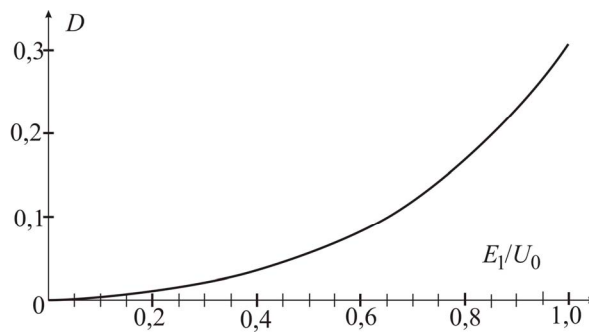


Рис. 5.10. Зависимость коэффициента прохождения  $D$  от отношения  $\chi = E_1/U_0$ .

Рисунок 5.10 демонстрирует подбарьерное распространение квантовых частиц. Чем больше кинетическая энергия падающей частицы (то есть при  $E_1/U_0 \rightarrow 1$ ), тем больше коэффициент прохождения сквозь барьер, больше вероятность оказаться частице по другую сторону барьера. Это именно прохождение сквозь барьер (туннелирование), а не перепрыгивание через барьер. При этом энергия частицы и в области 2, и в области 3 равна исходной энергии частицы в области 1.

Туннельный эффект проявляется в ходе многочисленных химических и биохимических реакций, он лежит в основе эффекта

холодной эмиссии электронов (задача 5.6) и теории  $\alpha$ -распада (задача 5.7).

Отметим, что зависимости  $D(E_1)$  при  $E_1 < U_0$  и  $E_1 > U_0$  всегда гладко и непрерывно стыкуются (см. рис. 5.11).

Зависимость коэффициента прохождения  $D(L)$  от ширины барьера  $L$  при  $E_1/U_0 = 0,9$  представлена на рис. 5.12. Коэффициент прохождения равен 0,5 при ширине барьера  $L \approx 1,8\hbar/\sqrt{2mU_0}$ .

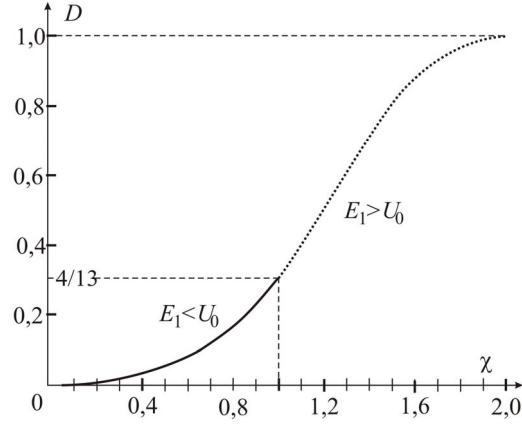


Рис. 5.11. Зависимость коэффициента прохождения прямоугольного потенциального барьера  $D(\chi)$  от энергии  $E_1$  падающей частицы при  $L\sqrt{2mU_0}/\hbar = 3$  ( $\chi = E_1/U_0$  — безразмерный параметр).

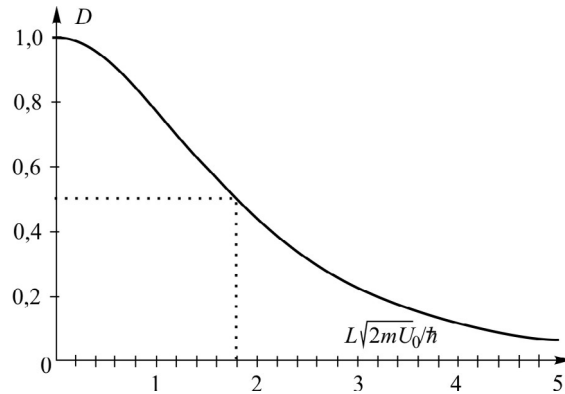


Рис. 5.12. Зависимость коэффициента прохождения  $D(L)$  от ширины барьера  $L$  (от безразмерного параметра  $L\sqrt{2mU_0}/\hbar$ ) при  $E_1/U_0 = 0,9$ .

**Ответ.**

$$D = \frac{8E_1(U_0 - E_1)}{8U_0E_1 - 8E_1^2 - U_0^2 + U_0^2 \operatorname{ch}\left(2L\sqrt{2m(U_0 - E_1)}/\hbar\right)},$$

$$R = 1 - \frac{8E_1(U_0 - E_1)}{8U_0E_1 - 8E_1^2 - U_0^2 + U_0^2 \operatorname{ch}\left(2L\sqrt{2m(U_0 - E_1)}/\hbar\right)}.$$

#### §5.4. Глубокое туннелирование

Следствием решения задачи 5.4 является **асимптотический вид коэффициента прохождения (5.34) при глубоком туннелировании** (широкий барьер и  $E_1 \ll U_0$ ).

В выражении (5.34) для коэффициента прохождения прямоугольного барьера при выполнении условия  $\frac{L}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E_1)} \gg 1$  (например, при заметном превышении высоты порога над энергией частицы  $U_0 \gg E_1$  и при достаточно больших  $L$ ) значение  $\operatorname{ch}\left(2L/\hbar\sqrt{2m(E_1 - U_0)}\right) \approx \frac{1}{2}\exp\left(2L/\hbar\sqrt{2m(E_1 - U_0)}\right)$  — экспоненциально велико.

С учетом неравенства  $U_0 \gg E_1$ , из (5.34) и (5.36) получаем асимптотическую оценку  $D'$  для коэффициента прохождения:

$$D' = D|_{U_0 \gg E_1} = \frac{8E_1(U_0 - E_1)}{8U_0E_1 - 8E_1^2 - U_0^2 + U_0^2 \operatorname{ch}\left(2L\sqrt{2m(U_0 - E_1)}/\hbar\right)} \Big|_{U_0 \gg E_1} \approx$$

$$\approx \frac{8E_1}{U_0 \exp\left(2\sqrt{2m(U_0 - E_1)}L/\hbar\right)} = \frac{16E_1}{U_0} \exp\left(-2\frac{L}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E_1)}\right) =$$

$$= 16\chi \exp\left(-2\frac{L}{\hbar}\sqrt{2mU_0(1 - \chi)}\right), \quad (5.37)$$

Окончательно (5.37) представим в виде

$$D' = D_0 \exp(-\alpha), \quad (5.38)$$

где

$$D_0 = \frac{16 E_1}{U_0} = 16\chi, \quad (5.39)$$

$$\alpha = 2 \frac{L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E_1)} = 2 \frac{L}{\hbar} \sqrt{2mU_0(1 - \chi)}, \quad (5.40)$$

а  $\chi = E_1 / U_0$ .

Сопоставление зависимостей коэффициентов  $D$  и  $D'$  от энергии (от безразмерного параметра  $E_1 / U_0$ ) представлено на рис. 5.13. При расчетах полагалось  $L\sqrt{2mU_0} / \hbar = 3$ . Видно, что даже при  $E_1 = U_0$  отклонение  $D'$  от  $D$  составляет менее 10%.

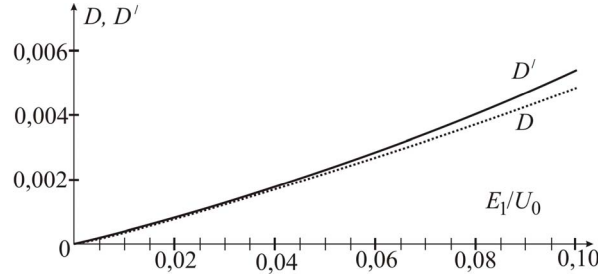


Рис. 5.13. Сравнение зависимостей от энергии точного коэффициента  $D(E_1)$  (пунктирная линия) и асимптотического приближения (5.37) (сплошная линия), соответствующего формуле  $D' = D_0 \exp(-\alpha)$ .

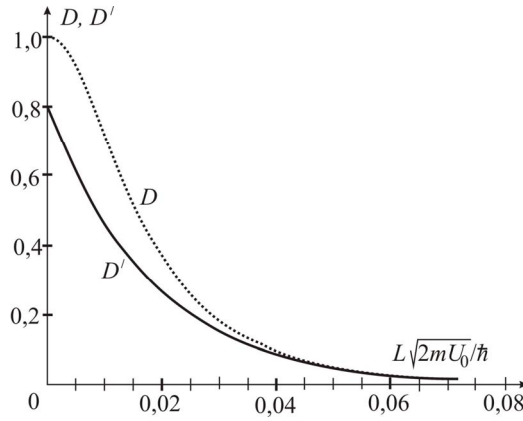


Рис. 5.14. Сравнение зависимостей точного коэффициента прохождения  $D(L)$  и асимптотического приближения  $D'(L)$  (5.37) от ширины барьера  $L$  при значении  $E_1 / U_0 = 0,05$ .

Сопоставление зависимостей коэффициентов  $D$  и  $D'$  от ширины барьера  $L$  (от безразмерного параметра  $\frac{L}{\hbar}\sqrt{2mU_0}$ ) представлено на рис. 5.14. Отклонение  $D'$  от  $D$  порядка 20% наблюдается только при  $L \rightarrow 0$ .

Рисунки 5.13 и 5.14 демонстрируют возможность замены  $D$  на  $D'$  для прямоугольного барьера при глубоком туннелировании (т.е. при  $E_1 \ll U_0$  и при достаточно широком барьере).

**Замечание.** Анализируя результаты рассмотренных выше задач, можно сделать вывод, что туннельный эффект – принципиально квантовый эффект. Если ширина потенциального барьера меньше или порядка длины волны де Бройля, то частица с определенной вероятностью может при «падении» на барьер оказаться с другой его стороны без изменения энергии. В этом сущность подбарьерного туннельного эффекта. Например, при выбранных для рис. 6.12 параметрах длина волны де Бройля частицы равна  $\lambda \approx 6,6\hbar/\sqrt{2mU_0}$ , и коэффициент прохождения имеет существенные значения во всей представленной области  $L < 5\hbar/\sqrt{2mU_0}$ .

**Задача 5.5.** Частица туннелирует сквозь барьер произвольной формы  $U(x)$  (рис. 5.15). Энергия частицы  $E_1 \ll U_0$ , где  $U_0$  – максимальное значение потенциальной энергии. Получить асимптотическую формулу для коэффициента прохождения барьера.

**Решение.** Рассмотрим барьер произвольной формы (рис. 5.15), отмечая точки  $x_1$  и  $x_2$ , в которых  $U(x) = E_1$ .

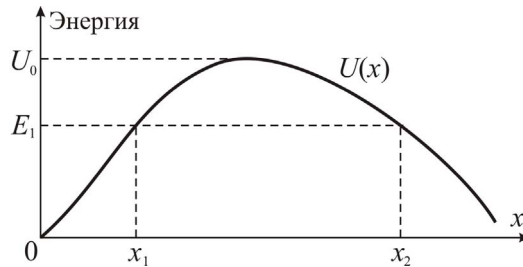


Рис. 5.15 . Барьер произвольной формы.

Потенциальный барьер произвольной формы представим в виде последовательности потенциальных барьеров прямоугольной формы (минибарьеров) высотой  $U_{0i}$ .

Максимальное затухание волновая функция испытывает при прохождении минибарьеров с энергией  $U_{0i} \geq E_1$ , находящихся вблизи вершины потенциального барьера  $U(x)$ . Коэффициенты прохождения сквозь эти минибарьеры вносят определяющий вклад в результирующий коэффициент прохождения через барьер  $U(x)$ . Поэтому можно считать, что итоговый коэффициент прохождения равен произведению коэффициентов прохождения последовательности высоких минибарьеров, для которых  $U_{0i} \geq E_1$ . Для коэффициента прохождения сквозь высокий минибарьер используем асимптотическую формулу (5.38).

Значительнее всего в коэффициентах прохождения минибарьеров, рассчитанных с помощью формулы (5.38), меняется экспоненциальный множитель, а коэффициент перед экспонентой  $D_0 = 16E_1/U_0$  меняется незначительно, оставаясь всегда порядка единицы.

Используя для коэффициентов прохождения всех прямоугольных минибарьеров, имеющих высоту  $U_{0i} \geq E_1$ , асимптотическую формулу (5.38), для коэффициента прохождения сквозь барьер произвольной формы получаем формулу:

$$D = D_0 \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E_1)} dx \right]. \quad (5.41)$$

В формуле (5.41) интегрирование ведется в интервале  $[x_1, x_2]$  (см. рис. 5.15). Внутри интервала  $(x_1, x_2)$   $U(x) > E_1$ , а на границах  $U(x_1) = U(x_2) = E_1$ .

**Ответ.**  $D = D_0 \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E_1)} dx \right]$ , где  $x_1$  и  $x_2$

находятся из условия  $U(x_1) = U(x_2) = E_1$ .

**Задача 5.6. (Холодная эмиссия электронов из металла.)** Как уже упоминалось выше (§1.2), металл для электронов может рассматриваться как потенциальная яма глубины  $U_0$  (рис. 5.16, при

$x < 0$ ). У поверхности металла ( $x = 0$ ) существует однородное электрическое поле с напряженностью  $\mathbf{E} = \mathcal{E}\mathbf{e}_x$ , перпендикулярной поверхности (вдоль оси  $OX$ , рис. 5.16). Внутри металла электроны проводимости имеют энергию  $E_1 < U_0$ . Найти зависимость силы тока холодной эмиссии электронов сквозь барьер от величины напряженности электрического поля. Использовать асимптотическую формулу (5.41).

**Решение:** Поскольку электрическое поле не проникает внутрь металла, то потенциальную энергию электрона проводимости можно представить в виде (рис. 6.16):

$$\begin{aligned} U(x) &= U_0 - e\mathcal{E}x, & x > 0 \\ U(x) &= 0, & x < 0 \end{aligned} \quad (5.42)$$

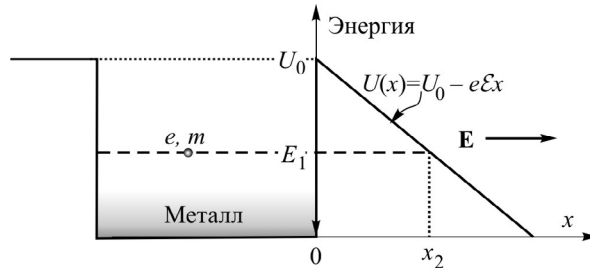


Рис. 5.16. Потенциальный барьер для электрона в металле при наложении внешнего электрического поля с напряженностью  $\mathbf{E}$ .  $m$  – масса,  $e$  – заряд электрона.

Для коэффициента прохождения электрона через барьер (5.42) используем асимптотическую формулу (5.41):

$$D \approx D_0 \exp(-\alpha), \quad (5.43)$$

где  $\alpha = \frac{2}{\hbar} \int_0^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E_1]} dx$ .

Зная потенциальную энергию (5.42), находим  $x_2 = \frac{U_0 - E_1}{e\mathcal{E}}$  и

$$\alpha = \frac{2}{\hbar} \int_0^{(U_0 - E_1)/(e\mathcal{E})} \sqrt{2m[U_0 - E_1 - e\mathcal{E}x]} dx = \frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e\mathcal{E}} (U_0 - E_1)^{3/2}. \quad (5.44)$$



Сила тока холодной эмиссии пропорциональна коэффициенту подбарьерного прохождения и, таким образом, может быть записана в виде

$$J = J_0 \exp \left[ -\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar e \mathcal{E}} (U_0 - E_1)^{3/2} \right].$$

Для металлов  $U_0 - E_1 \approx 3 \div 4 \text{ эВ}$  и  $\alpha = \frac{10^8 [\text{В/м}]}{\mathcal{E}}$ , и силу тока

можно оценить по формуле  $J = J_0 \exp \left( -\frac{10^8 [\text{В/м}]}{\mathcal{E}} \right)$  (рис. 5.17).

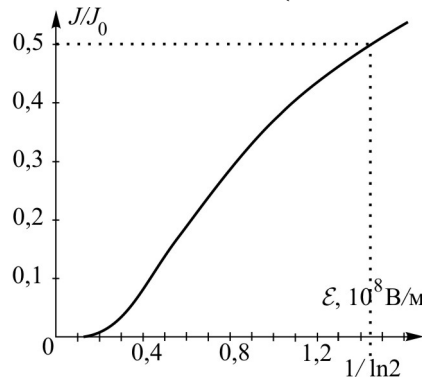


Рис. 5.17. Зависимость силы тока  $J$  холодной эмиссии от напряженности  $\mathcal{E}$  электрического поля.

**Ответ:**  $J = J_0 \exp \left[ -\frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} (U_0 - E_1)^{3/2} \right].$

**Задача 5.7. Радиоактивный распад** — это самопроизвольное изменение состава ядра (заряда, массового числа) в результате испускания элементарных частиц или ядерных фрагментов. Распад имеет квантовомеханический характер, он происходит путем туннелирования вылетающей из ядра частицы сквозь потенциальный барьер. Радиоактивный распад не зависит ни от температуры, ни от давления, что является принципиальным отличием его от процессов химических превращений.

Рассмотрим следующую модель  $\alpha$ -распада (испускания  $\alpha$ -частицы — ядра атома He). **Материнское ядро** (исходное ядро атома) с зарядом  $(Z+2)e$  состоит из дочернего ядра с зарядом  $Ze$  и

$\alpha$ -частицы с зарядом  $2e$  и массой  $m$ . Пусть ядерные силы притяжения действуют на  $\alpha$ -частицу на расстояниях  $r < r_0$ , где  $r_0$  — радиус ядра, формируя потенциальную яму прямоугольной формы. А при  $r > r_0$  на  $\alpha$ -частицу действуют силы кулоновского отталкивания положительно заряженной  $\alpha$ -частицы (с зарядом  $+2e$ ) от положительно заряженного дочернего ядра (ядра, оставшегося после распада исходного материнского ядра) с зарядом  $+Ze$ . Совокупное действие отталкивающего кулоновского и притягивающего ядерного взаимодействий образуют потенциальный барьер  $U(r)$ , схематически представленный на рис. 5.18. Используя асимптотическую формулу (5.41), определите вероятность  $w$  испускания  $\alpha$ -частицы за единицу времени и время полураспада  $\tau$  материнского ядра. Средняя скорость движения  $\alpha$ -частицы внутри ядра  $v$ .

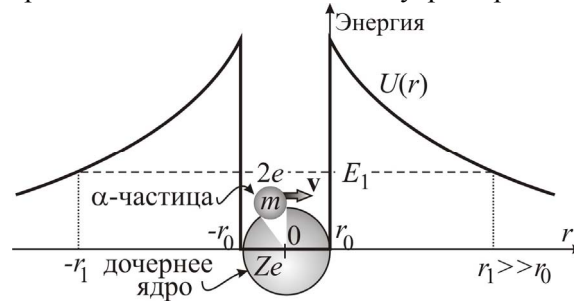


Рис. 5.18. Потенциальная энергия  $U(r)$  взаимодействия  $\alpha$ -частицы и дочернего ядра.  $r_0$  — радиус радиоактивного ядра,  $E_1$  — кинетическая энергия движения  $\alpha$ -частицы.

**Решение.** Вероятность  $w$  излучения  $\alpha$ -частицы в единицу времени пропорциональна произведению частоты ударов  $\nu$  (числа ударов в единицу времени) о стенки потенциальной ямы и коэффициента прохождения потенциального барьера  $D$ :

$$w = \nu \cdot D. \quad (5.45)$$

Частота ударов  $\alpha$ -частицы о стенки потенциальной ямы равна

$$\nu = \frac{v}{2r_0}.$$

Форма потенциального барьера определяется энергией кулоновского отталкивания  $\alpha$ -частицы и дочернего ядра:

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r}. \quad (5.46)$$

Значение  $r_1$  находится из условия  $U(r_1) = E_1$ :

$$r_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{E_1}. \quad (5.47)$$

Для вычисления коэффициента прохождения через потенциальный барьер (5.46) используем асимптотическую формулу (5.41):

$$D = D_0 \exp(-\alpha),$$

где

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m[U(r) - E_1]} dr = \frac{\sqrt{8mE_1}}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E_1} \frac{1}{r} - 1} \cdot dr = \\ &= \frac{\sqrt{8mE_1}}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\frac{r_1}{r} - 1} \cdot dr. \end{aligned}$$

Для вычисления интеграла произведем замену переменной  $\xi = \sqrt{r/r_1}$ . Тогда

$$\alpha = \frac{\sqrt{8mE_1}}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\frac{r_1}{r} - 1} \cdot dr = \frac{2r_1\sqrt{8mE_1}}{\hbar} \int_{\sqrt{r_0/r_1}}^1 \sqrt{1 - \xi^2} \cdot d\xi.$$

Поскольку по условию задачи  $r_0 \ll r_1$ , то в нижнем пределе интеграла можно положить  $\sqrt{r_0/r_1} \approx 0$ . Тогда

$$\begin{aligned} \int_0^1 \sqrt{1 - \xi^2} d\xi &= \left[ \frac{\xi}{2} \sqrt{1 - \xi^2} + \frac{1}{2} \arcsin \xi \right]_0^1 = \frac{\pi}{4}, \\ \alpha &= \frac{\pi r_1 \sqrt{2mE_1}}{\hbar} = \frac{Ze^2}{2\hbar\epsilon_0} \sqrt{\frac{2m}{E_1}} \end{aligned}$$

и коэффициент прохождения

$$D = D_0 \exp \left[ -\frac{Ze^2}{2\hbar\epsilon_0} \sqrt{\frac{2m}{E_1}} \right] = D_0 \exp \left[ -\frac{Ze^2}{\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v} \right],$$

где учтено, что кинетическая энергия  $\alpha$ -частицы  $E_1 = mv^2/2$ .

Вероятность распада за единицу времени  $w$  (5.47) принимает вид

$$w = \frac{v}{2r_0} D = \frac{vD_0}{2r_0} \exp\left[-\frac{Ze^2}{\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v}\right]. \quad (5.48)$$

Вероятность (5.48) определяет долю ядер, распавшихся за единицу времени, а доля ядер  $-dN/N$ , распавшихся за время  $dt$  равна

$$\frac{-dN}{N} = w dt. \quad (5.49)$$

Интегрируя (5.49), для числа распадающих за время  $t$  ядер получаем

$$N = N_0 \exp[-wt], \quad (5.50)$$

где  $N_0$  – исходное число целых ядер в момент времени  $t = 0$ .

Время полураспада – время  $\tau$ , в течение которого половина ядер распадается, определяется из (5.50):

$$\tau = \frac{\ln 2}{w} = 2 \ln 2 \frac{r_0}{vD_0} \exp\left[\frac{Ze^2}{\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v}\right].$$

При оценке  $D_0 = \frac{16E_1}{U_0}$  для  $U_0$  можно взять значение потенциальной энергии при  $r = r_0$ :

$$D_0 = \frac{16E_1}{U_0} = \frac{16m\pi\epsilon_0 r_0 v^2}{Ze^2}.$$

Тогда для частоты ударов и времени полураспада получаем

$$w = \frac{8\pi\epsilon_0 m v^3}{Ze^2} \exp\left[-\frac{Ze^2}{\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v}\right] \quad \text{и} \quad \tau = \frac{Ze^2 \ln 2}{8\pi\epsilon_0 m v^3} \exp\left[\frac{Ze^2}{\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v}\right].$$

Полученные зависимости  $w(v)$  и  $\tau(v)$  представлены на рис. 5.19 для урана  $Z = 92$ .

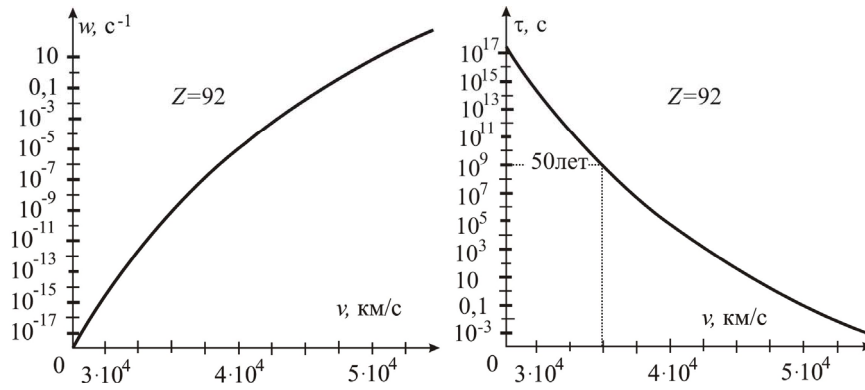


Рис. 5.19. Зависимости частоты ударов  $w(v)$  и времени полураспада  $\tau(v)$  от скорости движения  $\alpha$ -частицы внутри ядра урана, полученные в рамках выбранной в задаче модели.

**Ответ.**  $w = \frac{8\pi\epsilon_0 m v^3}{Ze^2} \exp\left[-\frac{Ze^2}{\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v}\right], \quad \tau = \frac{Ze^2 \ln 2}{8\pi\epsilon_0 m v^3} \exp\left[\frac{Ze^2}{\hbar\epsilon_0} \cdot \frac{1}{v}\right].$

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D5.1.** Электрон с кинетической энергией  $E = 2$  эВ, двигаясь в положительном направлении оси  $OX$ , попадает в потенциальное поле в виде «ступеньки» (см. рис. 4.1a). Высота барьера (ступеньки)  $U_0 = 5$  эВ. Найти эффективную глубину проникновения электрона в область  $x > 0$ , т.е. расстояние от границы барьера до точки, где плотность вероятности нахождения уменьшается в  $e$  раз.

**Ответ.**  $l = \frac{1}{2\gamma} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}} = 5,64 \cdot 10^{-11} \text{ м},$  где

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

**Задача D5.2.** Электрон с кинетической энергией  $E_1$  попадает в потенциальное поле в виде прямоугольного барьера (рис. 4.9). Ширина барьера  $L$ , высота  $U_0$ . Найти вероятность  $D$  прохождения

сквозь потенциальный барьер. Использовать формулу:

$$D = D_0 \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E_1)} dx \right].$$

**Ответ.**  $D = D_0 \exp \left[ -\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E_1)} \right].$

**Задача D5.3.** Поток электронов с энергией  $E = 1$  эВ падает на прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0 = 8$  эВ и толщиной  $L = 0,5$  нм (рис. 4.9). Какая доля электронов  $\Delta N/N$  пройдет через потенциальный барьер? Использовать формулу

$$D = \frac{16E}{U_0} \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right].$$

**Ответ.**  $\frac{\Delta N}{N} = \frac{16E}{U_0} \exp \left[ -\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right] = 2,3 \cdot 10^{-3}.$

**Задача D5.4.** С помощью формулы (5.41)

$$D = D_0 \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right]$$

найти вероятность прохождения частицы с массой  $m$  и энергией  $E$  сквозь потенциальный барьер треугольной формы, изображенный на рис. 5.20.

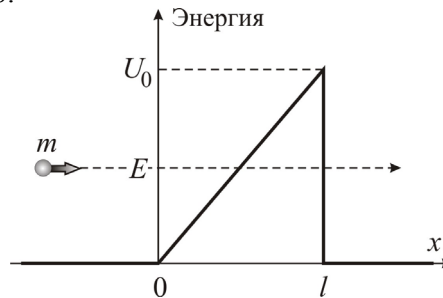


Рис.5.20. Вид потенциального барьера для частицы.

**Ответ.**  $D = D_0 \exp \left[ -\frac{4l\sqrt{2m}}{3\hbar U_0} (U_0 - E)^{3/2} \right].$

**Задача D5.5.** С помощью формулы (5.41):

$$D = D_0 \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right]$$

найти вероятность прохождения частицы с массой  $m$  и энергией  $E$  сквозь потенциальный барьер параболической формы:  $U(x) = U_0 \left[ 1 - (x/l)^2 \right]$  (рис. 5.21).

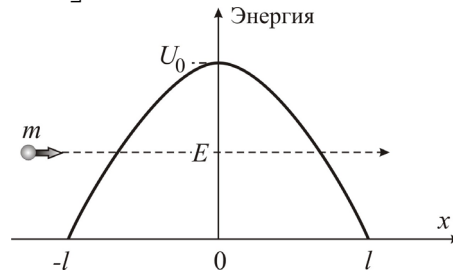


Рис.5.21. Вид потенциального барьера для частицы.

**Ответ.**  $D = D_0 \exp \left[ -\frac{\pi l \sqrt{2m}}{\hbar \sqrt{U_0}} (U_0 - E) \right].$

**Задача D5.6.**  $\alpha$ -частица находится в кулоновском потенциальном поле ядра. Радиус ядра равен  $r_0 = 1,4 \cdot 10^{-15}$  м, высота потенциального барьера на поверхности ядра составляет  $U_0 = 4$  МэВ. Кинетическая энергия  $\alpha$ -частицы  $E_1 = 1$  МэВ. Определить коэффициент прохождения  $\alpha$ -частицей потенциального барьера атомного ядра.

**Ответ.**  $D = \frac{16 E_1}{U_0} \exp \left[ -\frac{\pi \sqrt{2m_\alpha} r_0 U_0}{\hbar \sqrt{E_1}} \right] = 1,8 \cdot 10^{-3}.$

## Глава 6

## ОБЪЕМ КВАНТОВОГО СОСТОЯНИЯ. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

## §6.1. Частица в одномерной потенциальной яме

**Задача 6.1.** Частица с массой  $m$  находится в одномерной потенциальной яме – «потенциальном ящике». График потенциальной энергии показан на рис. 6.1. Ширина потенциальной ямы  $L$ , глубина  $U_0$ . Исходя из периодического (циклического) **граничного условия Борна–Кармана**

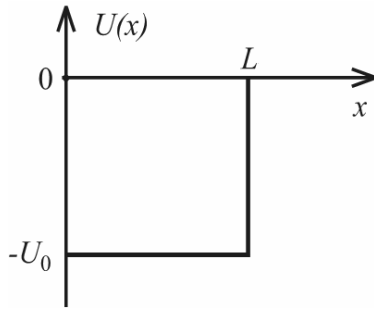


Рис. 6.1. Потенциальная энергия частицы  $U(x)$  в одномерном потенциальной яме длиной  $L$ .

$$\Psi(x+L) = \Psi(x), \quad (6.1)$$

определите возможные значения импульса  $p_x$ , кинетической энергии, а также минимальное значение импульса и плотность состояний частицы в потенциальной яме.

**Решение.** Условие Борна–Кармана фактически означает, что частица не различает «левой»

и «правой» границ ящика, т.е. фаза волны на одной из границ может отличаться от фазы волны на другой границе только на целое число  $2\pi$ . Это условие напоминает условие квантования орбит в атоме Бора.

Для волны де Бройля  $\Psi(r, t) = Ce^{i(\omega t - kr)}$  условие Борна–Кармана

$$Ce^{i(\omega t - kx)} = Ce^{i(\omega t - k(x+L))}$$

выполняется, если  $e^{-ikL} = 1$ , т.е.  $\cos(kL) = 1$ . Отсюда следует условие квантования для волнового числа:

$$k_n L = 2\pi n, \quad (6.2)$$

или

$$k_n = \frac{2\pi}{L} n, \quad (6.3)$$



и для импульса:

$$p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n. \quad (6.4)$$

Согласно (7.3), на ширине потенциальной ямы  $L$  должно укладываться целое число длин волн:

$$L = n\lambda_n. \quad (6.5)$$

Разность фаз  $\Delta\varphi = \Delta(\omega t - kr)$  на границах ямы равна  $\varphi(L) - \varphi(0) = kL = 2\pi n$ , т.е. разность фаз на границах ямы может отличаться только на целое число  $2\pi$ .

Волновой вектор может принимать только дискретные значения (6.3), отличающиеся на  $\delta k_x = 2\pi/L$ . Так как состояние частицы определяется ее волновым вектором (или импульсом) и энергией, связанной с импульсом законом дисперсии, то величина  $\delta k_x = 2\pi/L$  является **объемом квантового состояния частицы** в пространстве волновых векторов в одномерном случае. В двумерном случае объем равен  $\delta k_x \delta k_y = (2\pi/L)^2$ , в трехмерном –  $\delta k_x \delta k_y \delta k_z = (2\pi/L)^3$ . В пространстве импульсов квантовый объем записывается аналогично:

в одномерном случае  $\delta p_x = 2\pi\hbar/L$ ;

в двумерном  $\delta p_x \delta p_y = (2\pi\hbar/L)^2$ ;

в трехмерном  $\delta p_x \delta p_y \delta p_z = (2\pi\hbar/L)^3$ .

Понятие объема состояния в импульсном пространстве (**р**-состояния) имеет глубокий квантово-механический смысл, связанный с соотношением неопределенностей Гейзенберга  $\delta p_x \delta x \geq \hbar$ , где  $\delta p_x$  и  $\delta x$  неопределенности импульса и координаты частицы при их одновременном определении. Описывая частицу волной, естественно считать, что неопределенность координаты частицы имеет порядок длины  $L$ , ограничивающей область движения:  $\delta x \approx L$ . При этом неопределенность волнового вектора на длине  $L$

$$\delta k_x = \frac{1}{\hbar} \delta p_x \geq \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar}{\delta x} = \frac{2\pi}{L}$$

можно рассматривать как объем состояния частицы в **к**-пространстве (объем **к**-состояния).

С учетом условия нормировки  $\int_0^L \Psi \Psi^* dx = 1$ , комплексную амплитуду волновой функции частицы  $\Psi(x)$  можно представить в виде:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(2\pi n/L)x}. \quad (6.6)$$

Из (6.4) с учетом закона дисперсии следует условие квантования энергии

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2mL^2} n^2. \quad (6.7)$$

Чем больше номер  $n$  квантового состояния, тем больше энергия и больше разница  $\Delta E_{n,n+1}$  между разрешенными значениями энергии:

$$\Delta E_{n,n+1} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{mL^2} n. \quad (6.8)$$

Если разница между энергетическими уровнями мал, так что спектр можно считать квазинепрерывным, то можно ввести понятие **плотности состояний**  $dn/dE$ . По размерности – это число состояний, приходящееся на единичный интервал энергии.

Из (6.7) находим номер квантового состояния с энергией  $E$ :  $n = \frac{L\sqrt{2mE}}{2\pi\hbar}$ . Дифференцируя по энергии  $E$ , получаем число квантовых состояний  $dn$  в интервале энергии  $dE$  и плотность состояний:

$$\frac{dn}{dE} = \frac{L}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E_n}}. \quad (6.9)$$

Таким образом, в одномерном случае с увеличением энергии плотность состояний уменьшается.

Решение данной задачи еще раз показывает, что **если движение ограничено в координатном пространстве, то оно квантуется**. Квантование движения означает квантование импульса и энергии, каждым значениям которых соответствуют стационарные состояния. Набор разрешенных дискретных значений энергии называется **энергетическим спектром** частицы.

**Замечание.** Условие (6.1) отличается от условия возбуждения собственных (нормальных) колебаний в ограниченной среде, когда образуются стоячие волны и на длине  $L$  укладывается *целое число* длин *полуволн*:

$$L = n \cdot \lambda / 2. \quad (6.10)$$

В случае струны на границах

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0 \quad (6.11)$$

и  $|\Psi(0)|^2 = |\Psi(L)|^2 = 0$ , то есть вероятность перейти границу равна нулю.

Полная аналогия с обычными волнами не возможна, так как стационарные решения системы в случае (6.10) и (6.11) изображались бы стоячими волнами, образующимися в результате отражений волн. Скорость распространения энергии в стоячей волне равна нулю, а частица, поведение которой описывается волновой функцией, перемещается в области потенциальной ямы, перенося с собой энергию.

По условию (6.1) волновая функция периодична по  $L$ , и определена во всем пространстве как бегущая волна с однородной плотностью вероятности  $\Psi\Psi^* = 1/L$  (в отличие от стоячих волн, для которых  $\Psi\Psi^* = (2/L)\sin^2(n\pi x/L)$ ). Таким образом, условие Борна–Кармана обеспечивает непрерывность волновой функции на границах потенциальной ямы, сохраняя возможность использования бегущих волн для описания частиц.

$$\text{Ответ. } p_n = \frac{2\pi\hbar}{L}n, \quad E_n = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2mL^2}n^2, \quad p_1 = \frac{2\pi\hbar}{L}, \quad \frac{dn}{dE} = \frac{L}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E_n}}.$$

## §6.2. Частица в трехмерной потенциальной яме

### Задача 6.2. (Квантовые состояния молекул идеального газа.)

Идеальный газ, состоящий из  $N$  молекул, заключен в сосуд, имеющий форму куба со стороной  $L$ . Масса одной молекулы  $m$ . Определите степень вырождения энергетических уровней и число доступных состояний  $\Gamma(E, V, N)$  в интервале значений  $(E, E + dE)$  для одной молекулы и системы, состоящей из  $N$  одноатомных молекул.

**Решение.** В одномерном случае при прямолинейном движении частицы вдоль оси  $OX$  ее импульс может принимать значения, отмеченные точками на рис. 6.2 а (см. задачу 6.1). Если частица движется в двумерном координатном пространстве, то разрешенным значениям импульса  $\mathbf{p}_i$  на плоскости  $p_x p_y$  соответствуют центры квадратов со стороной  $2\pi\hbar/L$  (рис. 6.2 б). При движении в трехмерном координатном пространстве разрешенным значениям импульсов соответствуют центры кубиков со сторонами  $2\pi\hbar/L$  (рис. 6.2 в).

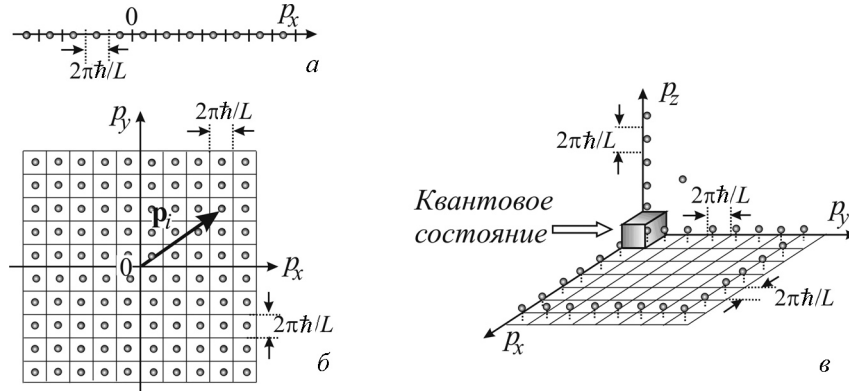


Рис. 6.2. Разрешенные дискретные значения проекций импульса в одномерном (а), двумерном (б) и трехмерном (в) случаях у молекулы газа могут принимать только дискретные значения, кратные  $2\pi\hbar/L$ .

Поскольку импульс характеризует состояние частицы в импульсном пространстве, то кубик со стороной  $2\pi\hbar/L$  представляет собой одно **квантовое состояние частицы в импульсном пространстве**. Объем одного квантового состояния равен

$$\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = \left( \frac{2\pi\hbar}{L} \right)^3 \quad (6.12)$$

Если известен импульс  $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$  частицы и масса  $m$ , то из закона дисперсии можно найти ее кинетическую энергию  $E$  (энергетический уровень, на котором находится данная частица):

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (6.13)$$

Если значение энергии частицы заключено в интервале  $(E, E + dE)$ , то в импульсном пространстве этому значению энергии соответствует множество квантовых состояний, отличающихся направлением импульса  $\mathbf{p}$ . Эти состояния заключены в сферическом слое (рис. 6.3), радиус которого  $p_E$  определяется из (6.13):

$$p_E = \sqrt{2mE}. \quad (6.14)$$

Дифференцируя уравнение (6.14) по энергии, находим связь интервала энергии  $dE$  с толщиной сферического слоя  $dp_E$  в импульсном пространстве:

$$dp_E = \sqrt{\frac{m}{2E}} dE. \quad (6.15)$$

Число микросостояний, соответствующих значениям энергии в интервале  $(E, E + dE)$  — это число  $\Gamma_1$  доступных состояний одной частицы, находящейся в объеме

$V = L^3$  и имеющей заданное значение энергии. Полное число доступных состояний, имеющих одну и ту же энергию, называется **степенью вырождения** данного **энергетического уровня**  $g(E)$ . Оно равно объему шарового слоя  $4\pi p_E^2 \cdot dp_E$ , деленному на объем  $(2\pi\hbar/L)^3$  квантового состояния в импульсном пространстве:

$$\Gamma_1 \equiv g(E) = \frac{4\pi p_E^2 \cdot dp_E}{(2\pi\hbar/L)^3} = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} V \sqrt{E} dE. \quad (6.16)$$

Число состояний  $\Gamma_1 \equiv g(E)$ , соответствующих одному и тому же интервалу энергии  $(E, E + dE)$ , с ростом энергии ( $E_1 \rightarrow E_2 \rightarrow E_3$ ) увеличивается пропорционально  $\sqrt{E} dE$  (6.16),

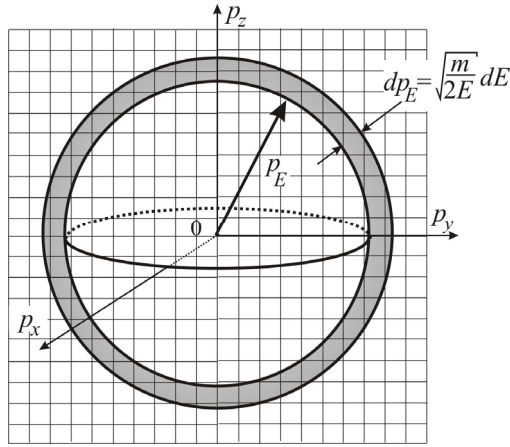


Рис. 6.3. Шаровой слой (затемнен), в котором находятся квантовые состояния молекулы идеального одноатомного газа, заключенной в объеме  $V = L^3$  и имеющей значение энергии в интервале  $(E, E + dE)$  и импульс  $p_E = \sqrt{2mE}$ .

несмотря на то что в импульсном пространстве ширина  $dp \sim dE / \sqrt{E}$  соответствующего сферического слоя уменьшается с ростом энергии:  $dp_1 > dp_2 > dp_3$  (рис. 6.4).

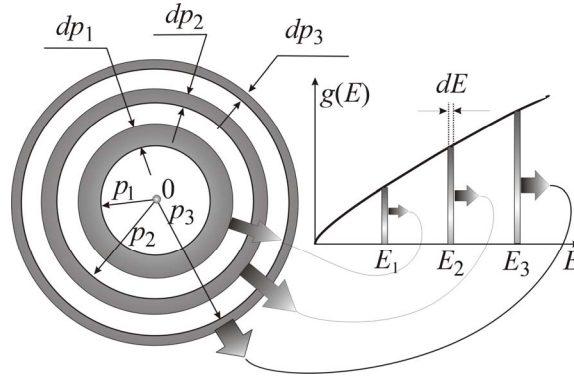


Рис. 6.4. При фиксированной ширине энергетического интервала  $dE$  с ростом энергии частицы ( $E_1 \rightarrow E_2 \rightarrow E_3$ ) ширина сферического слоя  $dp \sim dE / \sqrt{E}$  (6.15) в импульсном пространстве уменьшается  $dp_1 > dp_2 > dp_3$ , а степень вырождения (6.16) увеличивается.

Рассмотрим *систему из  $N$  молекул*, находящихся в кубическом сосуде объемом  $V = L^3$ , где  $L$  – длина стороны куба. Определим число доступных состояний этой системы с энергией, меньшей  $E$ , где  $E = \sum_{i=1}^N E_i$ , а  $E_i$  – энергия  $i$ -й частицы. Состояния всех  $N$  час-

тиц в импульсном пространстве описываются  $3N$  параметрами:  $(p_{1x}, p_{1y}, p_{1z}, p_{2x}, p_{2y}, p_{2z}, \dots, p_{Nx}, p_{Ny}, p_{Nz})$ . Поэтому искомые состояния находятся внутри  $3N$ -мерной сферы, радиус  $p_E$  которой в импульсном  $3N$ -мерном пространстве также определяется соотношением (6.15)  $p_E = \sqrt{2mE}$ . Действительно, максимальное значение, которое может иметь, например,  $p_{1x}$ , определяется условием равенства нулю проекций импульсов всех других частиц, а также  $p_{1y} = p_{1z} = 0$ .

В *одномерном* случае состояния, энергия которых  $\leq E$ , в пространстве импульсов находятся на интервале  $2p_E$  (удвоение обусловлено тем, что импульс может быть направлен как в положи-

тельном, так и в отрицательном направлении координатной оси): Число состояний  $\Omega_1$  равно

$$\Omega_1 = \frac{2p_E}{2\pi\hbar/L} \sim L \cdot p_E \sim L\sqrt{E}.$$

В *двумерном* случае  $\Omega_2$  пропорционально площади круга радиусом  $p_E$ :

$$\Omega_2 = \frac{\pi p_E^2}{(2\pi\hbar/L)^2} \sim L^2 \cdot p_E^2 \sim L^2 E.$$

В *трехмерном* случае  $\Omega_3$  пропорционально объему шара с радиусом  $p_E$ :

$$\Omega_3 = \frac{4}{3} \frac{\pi p_E^3}{(2\pi\hbar/L)^3} \sim L^3 \cdot p_E^3 = V \cdot E^{3/2}.$$

Следовательно, по аналогии можно ожидать, что в  $3N$ -мерном пространстве для импульсов  $N$  молекул число состояний  $\Omega_{3N}$  пропорционально

$$\Omega_{3N} \sim L^{3N} \cdot p_E^{3N} = V^N \cdot E^{3N/2}.$$

Определяя приращение  $d\Omega_{3N}$  при бесконечно малом возрастании энергии  $dE$ , получаем число состояний, энергия которых лежит в интервале  $(E, E + dE)$ :  $\Gamma_{3N} = d\Omega_{3N} \sim V^N E^{3N/2-1} dE$ .

Поскольку число молекул в газах очень велико, в показателе степени у энергии  $E$  можно пренебречь единицей. Тогда окончательно для изолированной системы «идеальный газ», состоящей из  $N$  одноатомных молекул, полное число доступных состояний  $\Gamma(E, V, N)$  с энергией в интервале значений  $(E, E + dE)$ :

$$\Gamma(E, V, N) \sim V^N E^{3N/2} dE. \quad (6.17)$$

### Замечания

1. Выше был рассмотрен случай, когда вероятность того, что частица имеет энергию  $E$ , не зависит от ее положения в объеме  $V$ . Если система находится во внешнем поле и энергия частиц различна в разных точках объема:  $E = E(\mathbf{r}_i)$ , то для  $N$  частиц следует рассматривать не только  $3N$ -мерное импульсное пространство  $\{\mathbf{p}_i\}$ , а

$6N$ -мерное фазовое пространство  $\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\}$  – пространство координат  $\mathbf{r}$  и импульсов  $\mathbf{p}$ . В этом случае объем квантового состояния частицы в координатно-импульсном фазовом пространстве равен  $\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z = (2\pi\hbar)^3$ . Число состояний в фазовом объеме  $dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z \cdot dx \cdot dy \cdot dz \equiv d\tau_{\mathbf{p}} d\tau_{\mathbf{r}}$  равно

$$dN = \frac{dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z \cdot dx \cdot dy \cdot dz}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \frac{d\tau_{\mathbf{p}} d\tau_{\mathbf{r}}}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Вероятность нахождения частицы в элементе фазового пространства  $d\tau_{\mathbf{p}} d\tau_{\mathbf{r}} = dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z \cdot dx \cdot dy \cdot dz$  вблизи точки  $(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$  фазового пространства можно трактовать, как вероятность того, что частица имеет заданную энергию  $E(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ , соответствующую этому элементу фазового пространства.

2. Вычисление термодинамической вероятности позволяет найти термодинамические параметры для системы «идеальный газ». Например, из соотношения (6.17) можно получить выражение для энтропии идеального газа:

$$S = k_B \ln \Gamma(E, V, N) = S_0 + Nk_B \ln V + \frac{3}{2} Nk_B \ln E.$$

Для одного моля идеального газа ( $N = N_A$ )

$$C_V = 3k_B N_A / 2 = 3R / 2 \quad \text{и} \quad S = k_B \ln \Gamma = S_0 + R \ln V + C_V \ln E,$$

где  $S_0$  – часть энтропии, не зависящая от энергии и объема.

**Ответ.**  $\Gamma_1 = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} V \sqrt{E} dE, \quad \Gamma(E, V, N) \sim V^N E^{3N/2} dE.$

### §6.3. Импульс и энергия Ферми

**Задача 6.3. (Электроны в металле.)** Найдите объем квантового состояния (в импульсном пространстве) для валентного электрона в металле, имеющем форму куба со стороной  $L$ . Определите импульс и максимально возможную энергию электронов при абсолютном нуле температур, а также плотность электронных состояний  $\rho(E)$ . Концентрация свободных электронов в металле  $n$ .

**Решение.** Благодаря кулоновскому полю положительно заряженных ионов полная энергия электронов в кристалле меньше, чем



в вакууме на величину, определяющую работу выхода электронов, например, при внешнем фотоэффекте (§1.2, 1.3). Поэтому кристалл можно рассматривать как потенциальный ящик для электронов, ограниченный поверхностью кристалла, с некоторым постоянным значением потенциала внутри объема кристалла (см. задачу 5.6). Таким образом, решение данной задачи аналогично решению задачи 6.1 и дискретные допустимые значения компонент волнового вектора (а следовательно, и импульса  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ ) в потенциальной яме равны

$$k_{xn} = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_{yn} = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_{zn} = \frac{2\pi}{L} n_z, \quad (6.18)$$

$$p_{xn} = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x, \quad p_{yn} = \frac{2\pi\hbar}{L_y} n_y, \quad p_{zn} = \frac{2\pi\hbar}{L_z} n_z, \quad (6.19)$$

где  $n_x, n_y, n_z = \pm 1, \pm 2, \dots$

Каждое разрешенное состояние занимает **элементарный квантовый объем в пространстве волновых векторов  $\mathbf{k}$** :

$$\Delta k_x \cdot \Delta k_y \cdot \Delta k_z = \frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z} = \frac{(2\pi)^3}{V},$$

**и импульсов  $\mathbf{p}$** :

$$\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} = \frac{h^3}{V}, \quad (6.20)$$

где  $V = L_x L_y L_z$  – объем кристалла.

Квантование волнового вектора (импульса) приводит к **квантованию кинетической энергии**. Так как  $L_x = L_y = L_z = L$ , то для кинетической энергии получаем выражение:

$$E(k_x, k_y, k_z) = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 n^2 = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m_0 V^{2/3}} n^2, \quad (6.21)$$

где  $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ .

Из формулы (6.21) следует, что одно и то же значение кинетической энергии (при фиксированном  $n$ ) может осуществляться при помощи различных комбинаций чисел  $n_x, n_y$  и  $n_z$ . Это означает, что нескольким квантовым состояниям с различными волновыми функциями отвечает одно и то же значение энергии. Например, **уровень энергии** с  $n^2 = 6$  для кубической потенциальной ямы может

реализовываться тремя различными комбинациями чисел  $(n_x, n_y, n_z)$ : (2,1,1), (1,2,1), (1,1,2), то есть является трехкратно **вырожденным**.

Ограничение движения электронов приводит к тому, что непрерывный энергетический спектр  $E = p^2/(2m)$ , характерный для свободного электрона, становится дискретным, с квантованными значениями импульса (6.19) и энергии (6.21) для электрона, движущегося в ограниченном пространстве кристалла.

Рассмотрим кристалл единичного объема  $L_x L_y L_z = V = 1$ . В таком кристалле число (концентрация) коллективизированных электронов равна  $n = zN$ , где  $N$  — число атомов,  $z$  — их валентность. Согласно принципу Паули для ферми-частиц (см. ниже §7.1), в каждом состоянии, занимающем в  $\mathbf{p}$ -пространстве объем, равный  $(2\pi\hbar)^3$ , могут находиться только два электрона с противоположно направленными спинами. При абсолютном нуле температуры электроны занимают самые низкие энергетические состояния.

Таким образом, при  $T = 0$  К электроны заполняют в  $\mathbf{p}$ -пространстве сферу (рис. 6.5), радиус которой  $p_F = \hbar k_F$  определяется из равенства числа электронов  $zN$  удвоенному (за счет состояний с различными спинами) числу элементарных квантовых ячеек (6.20) в объеме  $(4/3)\pi p_F^3$  сферы, то есть

$$2 \frac{(4/3)\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} = zN = n. \quad (6.22)$$

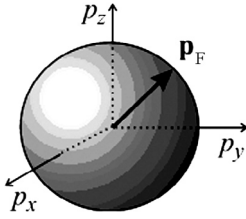


Рис. 6.5. Сфера Ферми в импульсном пространстве.

Максимально возможные значения импульса  $p_F$  и соответствующей ему энергии  $E_F$  электронов при  $T = 0$  К, называются соответственно **импульсом и энергией Ферми**. Изоэнергетическая по-

верхность  $E = E_F = \text{const}$  в пространстве импульсов, внутри которой все состояния заполнены при  $T = 0$  К, называется **поверхностью Ферми**. На основании (6.22) импульс и энергия Ферми определяются следующими соотношениями:

$$p_F = \hbar (3\pi^2 zN)^{1/3} = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad (6.23)$$

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3}. \quad (6.24)$$

Максимально возможное значение энергии электронов – энергия Ферми – растет с увеличением концентрации коллективизированных (валентных) электронов в металле пропорционально  $n^{2/3}$ .

Таким образом, можно сделать следующий вывод. При температуре  $T=0$  электроны в металле имеют различные импульсы в интервале  $0 \leq p \leq p_F$  (и энергии в интервале  $0 \leq E \leq E_F$ ), и это связано с ограниченностью движения электронов, квантованию их импульса и принципом Паули.

**Плотность энергетических состояний.** Число электронных состояний  $dn_s(E)$  с заданными значениями энергии в интервале от  $E$  до  $(E + dE)$  равно удвоенному (за счет двух противоположных направлений спина) числу элементарных квантовых ячеек (6.20) в  $\mathbf{p}$ -пространстве в сферическом слое радиусом  $p = (2mE)^{1/2}$  (6.14) и толщиной  $dp = d(2mE)^{1/2}$  (6.15):

$$dn_s(E) = 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} dE. \quad (6.25)$$

Таким образом, **плотность состояний**  $\rho(E)$ , т.е. число разрешенных состояний электронов в единичном интервале энергии, для кристалла единичного объема равна

$$\rho(E) \equiv \frac{dn_s}{dE} = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \sim \sqrt{E}. \quad (6.26)$$

Вид функции  $\rho(E)$  (6.26) показан на рис. 6.6. Плотность состояний  $\rho(E)$  растет с увеличением энергии  $\sim \sqrt{E}$ .

**Ответ.**  $\Delta p_x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta p_z = (2\pi\hbar)^3 / L^3$ ,

$$p_F = \hbar(3\pi^2 n)^{1/3}, \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3},$$

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E}.$$

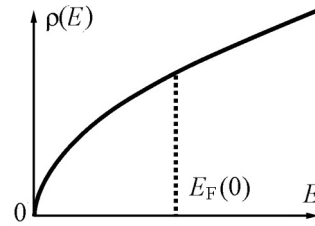


Рис. 6.6. Зависимость плотности состояний  $\rho(E)$  электронов в металле от энергии  $E$ .

**Задача 6.4.** Современные технологии позволяют из отдельных атомов формировать новые структуры, которые могут обладать определенными физическими свойствами, не наблюдаемыми в объектах иного масштаба. Оцените число атомов одновалентного

металла, необходимых для создания кластера, и его линейный размер  $L$ , чтобы максимальное расстояние между энергетическими уровнями электронов в кластере было бы равно  $\Delta E \approx k_B T$  при  $T = 1$  К. Межатомное расстояние принять равным  $a = 1$  Å.

**Решение.** Импульс электрона в металле принимает дискретные значения (6.19). Кванту импульса  $\Delta p_x = 2\pi\hbar/L$  (6.20) соответствует расстояние между энергетическими уровнями:

$$\Delta E = \Delta \left( \frac{p^2}{2m} \right) = \frac{1}{m} p_x \Delta p_x. \quad (6.27)$$

Энергетическое расстояние между уровнями увеличивается с ростом импульса  $p_x$  и максимально для электронов с импульсом Ферми, определяемым выражением (6.23):

$$p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3} = \frac{\hbar}{a} (3\pi^2)^{1/3}, \quad (6.28)$$

где концентрация для одновалентного металла равна  $n = 1/a^3$ ,  $a^3$  — объем элементарной ячейки:

Подставляя в (6.27) значение импульса (6.28) и  $\Delta p_x = 2\pi\hbar/L$ , имеем

$$\Delta E = \frac{1}{m} \frac{\hbar}{a} (3\pi^2)^{1/3} \frac{2\pi\hbar}{L} = \frac{2\pi (3\pi^2)^{1/3} \hbar^2}{maL}.$$

Из полученного соотношения находим размер кластера

$$L = \frac{2\pi (3\pi^2)^{1/3} \hbar^2}{am\Delta E}$$

и число атомов в нем:

$$N = \left( \frac{L}{a} \right)^3 = \frac{3\pi^2 (2\pi)^3 \hbar^6}{(a^2 m \Delta E)^3}.$$

Подставляя числовые данные, получаем:

$$L = \frac{2\pi (3\pi^2)^{1/3} \hbar^2}{ma\Delta E} = \frac{2\pi (3\pi^2)^{1/3} 10^{-68}}{9 \cdot 10^{-31} 10^{-10} 1,38 \cdot 10^{-23}} \approx 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ м},$$

откуда находим:

$$N = \left(\frac{L}{a}\right)^3 = \frac{\hbar^6 3\pi^2 (2\pi)^3}{(a^2 m \Delta E)^3} = \left(\frac{1,5 \cdot 10^{-4}}{10^{-10}}\right)^3 \approx 3 \cdot 10^{18}.$$

**Ответ.**  $L = \frac{2\pi(3\pi^2)^{1/3} \hbar^2}{ma\Delta E} \approx 1,5 \cdot 10^{-4} \text{ м} = 150 \text{ нм},$

$$N = \frac{\hbar^6 3\pi^2 (2\pi)^3}{(a^2 m \Delta E)^3} \approx 3 \cdot 10^{18}.$$

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D6.1.** Определите минимальную длину волны де Бройля для электронов в меди при  $T = 0 \text{ К}$ , если их концентрация равна  $n = 8,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

**Ответ.**  $\lambda = 2 \left[ \frac{\pi}{3n} \right]^{1/3} \approx 4,6 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 4,6 \text{ Å}.$

**Задача D6.2.** Определите импульс Ферми  $p_F$  для одновалентного металла с простой кубической решеткой и с периодом  $a = 3,3 \text{ Å}$ .

**Ответ.**  $p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3} = \frac{\hbar}{a} (3\pi^2)^{1/3} = 9,9 \cdot 10^{-25} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$

**Задача D6.3.** Рассчитать значение энергии Ферми в модели свободных электронов для Na, K и Al, если плотности и молярные массы этих веществ равны соответственно:  $\rho(\text{Na}) = 0,97 \text{ г/см}^3$ ,  $\rho(\text{K}) = 0,86 \text{ г/см}^3$ ,  $\rho(\text{Al}) = 2,7 \text{ г/см}^3$ ;  $M(\text{Na}) = 23,0 \text{ г/моль}$ ,  $M(\text{K}) = 39,1 \text{ г/моль}$ ,  $M(\text{Al}) = 27,0 \text{ г/моль}$ .

**Ответ.**  $E_F(\text{Na}) = 3,1 \text{ эВ}$ ,  $E_F(\text{K}) = 2,1 \text{ эВ}$ ,  $E_F(\text{Al}) = 11,7 \text{ эВ}.$

## Глава 7

АНСАМБЛИ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ.  
ФЕРМИОНЫ И БОЗОНЫ

## §7.1. Статистические закономерности ансамблей частиц

Рассмотрим системы, состоящие из большого числа ( $N \gg 1$ ) независимых (не взаимодействующих) идентичных микрочастиц. В таких системах проявляются определенные статистические закономерности распределения по энергетическим состояниям частиц, входящих в систему. Практически все свойства веществ в конденсированном состоянии (электрические и магнитные, теплоемкость и теплопроводность) определяются статистикой ансамбля частиц, составляющих вещество.

Все известные частицы делятся на два класса по величине собственного механического момента количества движения частиц. Собственный механический момент количества движения является свойством частиц и называется **спином** (от английского слова spin — «веретено»). Проекцию  $s_z$  спина электрона на выделенное направление (например, направление напряженности магнитного поля — ось  $z$ ) измеряют в единицах, равных постоянной Планка  $\hbar$ :  $s_z = \hbar s$ . Число  $s$  называется спиновым квантовым числом, которое может принимать только целые или полуцелые значения.

Частицы с полуцелым спиновым числом, у которых проекция спина  $s_z$  может принимать только полуцелые значения  $s_z = \pm \frac{1}{2}\hbar, \pm \frac{3}{2}\hbar, \pm \frac{5}{2}\hbar, \dots$ , называются **ферми-частицами**, или **фермионами**. Они подчиняются принципу запрета Паули и статистике Ферми–Дирака.

Частицы с целым спиновым числом, называются **бозе-частицами** или **бозонами**, они подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна.

Ферми- и бозе-частицы различаются симметрией полных волновых функций, описывающих систему частиц. Тип симметрии волновых функций определяет принцип заполнения частицами квантовых состояний.

Рассмотрим систему из двух одинаковых частиц. Пусть первая частица находится в состоянии  $\Psi_a(1)$ , а вторая – в состоянии  $\Psi_b(2)$ , причем обе волновые функции учитывают все параметры (как координатные, так и спиновые). Симметрия волновой функции системы проявляется при перестановке двух частиц. Поскольку частицы идентичны, то перестановка пары частиц не меняет физических параметров системы.

При отсутствии взаимодействия между частицами состояние всей системы может быть представлено как

$$\Psi_a(1)\Psi_b(2) \quad (7.1)$$

или, учитывая возможность перестановки идентичных частиц, как

$$\Psi_a(2)\Psi_b(1). \quad (7.2)$$

Таким образом, полная волновая функция системы, как линейная комбинация (7.1) и (7.2), может быть записана в виде симметричной волновой функции:

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_a(1)\Psi_b(2) + \Psi_a(2)\Psi_b(1) \}, \quad (7.3)$$

или в виде антисимметричной волновой функции:

$$\Psi_{as} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_a(1)\Psi_b(2) - \Psi_a(2)\Psi_b(1) \}. \quad (7.4)$$

Множитель  $1/\sqrt{2}$  соответствует условию нормировки (2.5).

Если состояния  $a$  и  $b$  являются одним и тем же состоянием, то  $\Psi_s = \sqrt{2}\Psi_a(1)\Psi_a(2)$ , а  $\Psi_{as} = 0$ . Это означает, что если две идентичные частицы находятся в одном и том же состоянии, то они могут описываться только симметричной полной волновой функцией. Это бозе-частицы. Ферми-частицы описываются антисимметричными волновыми функциями, поэтому две ферми-частицы не могут находиться в одном и том же состоянии. В этом заключается сущность принципа Паули.

**Принцип Паули (принцип запрета)**, сформулированный для ферми-частиц, запрещает двум (и более) тождественным частицам с полуцелым спином одновременно находиться в одном состоянии.

Для свободного электрона состояние задается значением волнового вектора  $\mathbf{k}$  и проекцией спина  $s_z$ . Поэтому в состоянии с за-

данным вектором  $\mathbf{k}$  могут находиться только два электрона со спиновыми числами противоположных знаков. Таким образом, принцип Паули объясняет корреляцию между частицами. Вероятность того, какая-либо частица займет то или иное состояние зависит от степени заполнения состояний остальными частицами.

Следует отметить, что квантовые свойства и статистические закономерности ансамблей тождественных частиц начинают проявляться ниже определенной температуры  $T_0$ , называемой **температурой вырождения**. При этой температуре длина волны де Бройля, соответствующая энергии теплового движения частиц, становится сравнимой со средним расстоянием между частицами. При  $T \gg T_0$  длина волны де Бройля частиц значительно меньше среднего расстояния между ними и квантовые свойства частиц не проявляются.

## §7.2. Ферми-частицы.

### Функция распределения Ферми–Дирака

**Задача 7.1.** Пусть ферми-частицы могут находиться на одном из двух уровней энергии:  $E_1$  со степенью вырождения  $g_1$  ( $g_1$  — число различных состояний частиц с одной и той же энергией  $E_1$ ) и  $E_2$  со степенью вырождения  $g_2$ . Число ферми-частиц велико  $n = n_1 + n_2 \gg 1$ , где  $n_1$  — число частиц в состояниях с энергией  $E_1$ , а  $n_2$  — число частиц в состояниях с энергией  $E_2$ . Ферми-частицы находятся в термодинамическом равновесии при температуре  $T$ . Напомним, что абсолютная температура, как параметр термодинамического равновесия, в статистической термодинамике определяется соотношением

$$\frac{d \ln \Gamma}{dE} = \frac{1}{k_B T}, \quad (7.5)$$

где  $\Gamma$  — термодинамическая вероятность состояния системы с энергией  $E$ .

Определите наиболее вероятное распределение  $n$  частиц по двум энергетическим уровням. Получите функцию распределения ферми-частиц — вероятность, с которой частица может находиться в состоянии с энергией  $E$ .

**Решение.** Термодинамическая вероятность  $\Gamma_1$  заполнения уровня энергии  $E_1$ , то есть число различных вариантов заполнения,



при которых из  $g_1$  состояний  $n_1$  заняты, а  $p_1 = g_1 - n_1$  состояний свободны, равно числу сочетаний  $C_{g_1}^{n_1}$ :

$$\Gamma_1 = C_{g_1}^{n_1} = \frac{g_1!}{(g_1 - n_1)!n_1!} = \frac{g_1!}{p_1!n_1!}.$$

Аналогично, число  $\Gamma_2$  возможных состояний системы, когда из  $g_2$  состояний с энергией  $E_2$  частицами занято  $n_2$  состояний, а  $p_2 = g_2 - n_2$  состояний свободны, равно

$$\Gamma_2 = C_{g_2}^{n_2} = \frac{g_2!}{(g_2 - n_2)!n_2!} = \frac{g_2!}{p_2!n_2!}.$$

При этом учитывается, что в каждом состоянии может находиться только одна ферми-частица с заданным направлением спина.

Число способов, которыми осуществляется такое распределение всей системы частиц по состояниям (термодинамическая вероятность данного распределения частиц), когда одновременно из  $g_1$  и  $g_2$  состояний с энергиями  $E_1$  и  $E_2$  заполнено частицами соответственно  $n_1$  и  $n_2$  состояний, определяется как произведение термодинамических вероятностей  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$ :

$$\Gamma = \Gamma_1 \Gamma_2 = \frac{g_1!g_2!}{n_1!p_1!n_2!p_2!}. \quad (7.6)$$

Термодинамическое равновесное состояние соответствует наиболее вероятному распределению  $n_1$  и  $n_2$ , при котором функция  $\Gamma$  (7.6) имеет максимум. Считая заданной температуру  $T$ , для определения равновесного распределения  $n_1$  и  $n_2$  воспользуемся соотношением (7.5). Для этого зададим изменение энергии системы  $dE$ , то есть рассмотрим некоторое возмущение, которое вызывает переход частиц с одного уровня энергии на другой. При этом увеличение числа заполненных состояний на уровне  $E_1$  происходит за счет уменьшения такого же числа состояний на уровне  $E_2$ , то есть  $dn_1 = -dn_2$ , так как полное число заполненных состояний (полное число частиц) остается постоянным. В результате энергия системы  $E = n_1E_1 + n_2E_2$  изменится на величину

$$dE = (E_1 - E_2) dn_1. \quad (7.7)$$

При таком переходе становится другой и величина термодинамической вероятности  $\Gamma$  распределения энергии. Найдем изменение ее логарифма  $d(\ln \Gamma)$ , учитывая, что

1) для больших чисел  $n$  справедлива формула Стирлинга:

$$\ln n! = n \ln n - n;$$

2) степени вырождения  $g_1$  и  $g_2$  в результате перехода не изменяются, и потому  $dg_1 = dg_2 = 0$ ;

3) полное число электронов в системе постоянно, т.е.  $dn_1 = -dn_2$ .

Логарифмируя и дифференцируя соотношение (7.6) и используя записанные выше условия, получаем:

$$\begin{aligned} d(\ln \Gamma) &= d(\ln(g_1!) + \ln(g_2!)) - \\ &- d(\ln(n_2!) + \ln(n_1!)) - d(\ln(p_1!) + \ln(p_2!)) = \ln\left(\frac{n_2 p_1}{n_1 p_2}\right) dn_1. \end{aligned}$$

Это выражение с учетом (8.8) можно переписать в виде:

$$\frac{d \ln \Gamma}{dE} = \frac{1}{E_1 - E_2} \ln \frac{n_2 p_1}{n_1 p_2}. \quad (7.8)$$

Учитывая (7.5) и разделяя параметры первого и второго энергетических уровней, запишем (7.8) в виде:

$$E_1 + k_B T \ln \frac{n_1}{p_1} = E_2 + k_B T \ln \frac{n_2}{p_2}.$$

Отсюда следует, что для системы, находящейся в термодинамическом равновесии при температуре  $T$ , выражение  $(E + k_B T \ln(n/p))$ , определяющее степень занятости  $n/p$  любого энергетического уровня  $E$ , для данного ферми-газа является величиной постоянной.

Обозначая эту константу как  $\mu$ , имеем:

$$E + k_B T \ln \frac{n}{p} = \mu. \quad (7.9)$$

Теперь учтем, что по определению функции распределения частиц по энергиям (плотность заполнения данных состояний частицами)  $f(E)$  число заполненных состояний  $n$  и число свободных состояний  $p$  можно представить в виде:  $n = g f(E)$ ;  $p = g - g f(E) = g(1 - f(E))$ .

Тогда (7.9) принимает вид:

$$E + k_B T \ln \frac{f(E)}{1-f(E)} = \mu. \quad (7.10)$$

Из (7.10) следует выражение для функции  $f(E)$  распределения ферми-частиц по энергии при температуре  $T$ , которое носит наименование **функции Ферми–Дирака**:

$$f(E) = \frac{1}{\exp \left[ \frac{E - \mu}{k_B T} \right] + 1}. \quad (7.11)$$

Функция  $f(E)$  равна вероятности того, что в системе идеального газа ферми-частиц, находящихся в тепловом равновесии при температуре  $T$ , одно из состояний с энергией  $E$  занято частицей. Вид функции (7.11) представлен на рис. 7.1 а.

**Ответ.**  $f(E) = \left( \exp \left( \frac{E - \mu}{k_B T} \right) + 1 \right)^{-1}.$

### Замечания

**1.** Величина  $\mu$  в (7.9) называется **химическим потенциалом**. Вероятность  $f(E)$  заполнения электроном состояния с энергией  $E = \mu$  при любых температурах (рис. 7.1 б) равна  $f(E=\mu) = 1/2$ . Введенное определение химического потенциала совпадает с термодинамическим определением химического потенциала, равного изменению любого термодинамического потенциала (внутренней энергии, энтальпии, свободных энергий Гиббса и Гельмгольца) при изменении числа частиц системы на единицу.

**2.** При  $T = 0$  К функция распределения Ферми–Дирака имеет вид ступеньки. Значение химического потенциала при  $T = 0$  К носит специальное название – **энергия Ферми**  $E_F$  (§6.3). Все состояния с  $E < E_F$  при  $T = 0$  К заняты, а с  $E > E_F$  – свободны.

При  $T > 0$  К, благодаря хаотическому тепловому движению частиц, функция распределения Ферми–Дирака размывается в окрестности энергии Ферми.

При низких температурах ( $k_B T \ll \mu$ ) функцию  $f(E)$  в области значений  $E$ , близких к  $\mu$ , можно аппроксимировать линейной зави-

симостью, если разложить  $f(E)$  в ряд Тейлора и ограничиться нулевым и первым членами разложения:  $f_{\text{lin}}(E) = f(\mu) + \left. \frac{\partial f}{\partial E} \right|_{\mu} (E - \mu)$ .

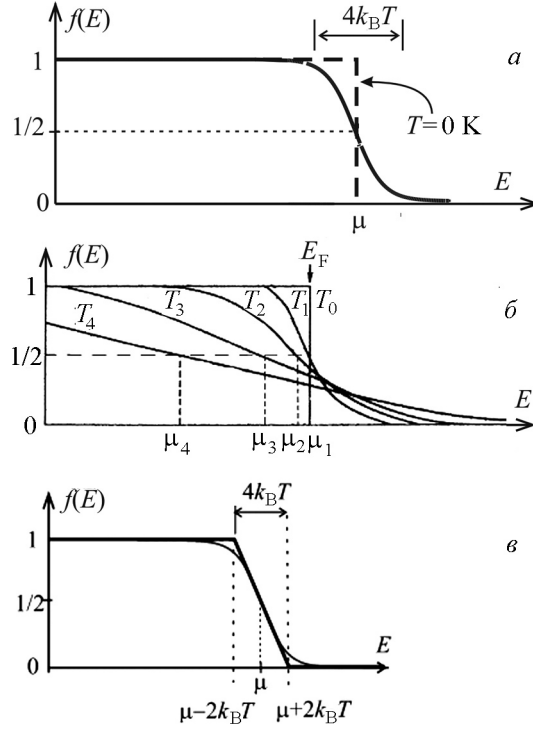


Рис. 7.1. Функция распределения Ферми–Дирака для различных температур при условии, что полное число частиц постоянно и не зависит от температуры:  $k_B T \ll \mu = E_F$  (а);  $T_4 > T_3 > T_2 > T_1 > T_0 = 0$  К (б), линейная экстраполяция (7.12) при низких температурах (в).

Линейная зависимость  $f_{\text{lin}}(E)$  для  $E$  вблизи  $\mu$  (рис. 7.1 в) совпадает с касательной к  $f(E)$  в точке  $E = \mu$ :

$$f_{\text{lin}}(E) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{1}{2k_B T} (E - \mu) \right]. \quad (7.12)$$

При линейной аппроксимации функция распределения достигает единицы при  $E_1 = \mu - 2k_B T$  и нуля — при  $E_2 = \mu + 2k_B T$ . Таким образом, можно считать, что «размытие» распределения Ферми–Дирака при низких температурах составляет  $\approx 4k_B T$ .

С ростом температуры ступенька Ферми размывается еще больше (рис. 7.1 б). Значение химического потенциала уменьшается и может стать отрицательным.

Значение  $E_F$  ( $\mu$  при  $T=0$ ) определяет **температуру вырождения ферми-газа**:

$$T_0 = E_F / k_B. \quad (7.13)$$

При  $T < T_0$  газ является вырожденным, так как подчиняется статистике Ферми – Дирака. При  $T > T_0$  газ не вырожден и подчиняется классической статистике.

**Задача 7.2.** Доказать, что для системы вырожденного газа ферми-частиц вероятность того, что состояние с энергией  $E_F + \delta$  занято, равна вероятности того, что состояние с энергией  $E_F - \delta$  свободно.

**Решение.** Запишем доказываемое соотношение  $f(E_F + \delta) = 1 - f(E_F - \delta)$ , используя явный вид функции распределения Ферми–Дирака:

$$\frac{1}{\exp\left(\frac{E_F + \delta - \mu}{k_B T}\right) + 1} = 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - \delta - \mu}{k_B T}\right) + 1}.$$

Поскольку газ вырожденный, то химический потенциал можно считать равным энергии Ферми:  $\mu = E_F$ , тогда  $E_F - \mu = 0$ :

$$\left[ \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} = 1 - \left[ \exp\left(-\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}.$$

Приведем правую часть последнего выражения к общему знаменателю:

$$\left[ \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} = \exp\left(-\frac{\delta}{k_B T}\right) \left[ \exp\left(-\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}.$$

Умножив числитель и знаменатель правой части на  $\exp[\delta/(k_B T)]$ , получим верное тождество:

$$\left[ \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \equiv \left[ 1 + \exp\left(\frac{\delta}{k_B T}\right) \right]^{-1}.$$

**Задача 7.3.** Найти значения функции распределения Ферми–Дирака  $f(E)$  для вырожденного ферми-газа при  $E = E_F + \delta_i$ , если  $\delta_1 = k_B T$ ,  $\delta_2 = 2k_B T$ ,  $\delta_3 = 4k_B T$ ,  $\delta_4 = 10k_B T$ . Для  $\delta_1$  оценить погрешность, допускаемую при линеаризации ступеньки в виде  $f_{\text{lin}}(E) = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{E - \mu}{2k_B T} \right)$  (7.12).

**Решение.** Учитывая, что для вырожденного Ферми-газа  $\mu = E_F$ , функцию распределения Ферми–Дирака можно представить в виде:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\delta_i}{k_B T}\right) + 1}.$$

Получаем следующие численные значений функций Ферми–Дирака :

$$f_1 = (1 + e)^{-1} \approx 0,27; \quad f_2 = (1 + e^2)^{-1} \approx 0,12; \quad f_3 = (1 + e^4)^{-1} \approx 0,018; \\ f_4 = (1 + e^{10})^{-1} \approx 4,5 \cdot 10^{-5}.$$

Относительная погрешность, допускаемая при линеаризации:

$$[f(\delta_1) - f_{\text{lin}}(\delta_1)] / f(\delta_1) \approx 0,074 = 7,4\%,$$

$$\text{где } f_{\text{lin}}(\delta_1) = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\delta_1}{2k_B T} \right) = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_B T}{2k_B T} \right) = 0,25.$$

$$\textbf{Ответ.} \quad f_1 = (1 + e)^{-1} \approx 0,27; \quad f_2 = (1 + e^2)^{-1} \approx 0,12; \\ f_3 = (1 + e^4)^{-1} \approx 0,018; \quad f_4 = (1 + e^{10})^{-1} \approx 4,5 \cdot 10^{-5}; \\ [f(\delta_1) - f_{\text{lin}}(\delta_1)] / f(\delta_1) \approx 0,074.$$

**Задача 7.4.** Вычислить значение энергии Ферми и температуру вырождения жидкого гелия  $^3\text{He}$ , считая его вырожденным ферми-газом. Плотность жидкого  $^3\text{He}$   $\rho = 0,081 \text{ г/см}^3$ .

**Примечание.** Атомы гелия существуют в двух стабильных изотопных состояниях,  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$ , с массами 3 и 4 соответственно. Структура электронных оболочек:  $1s^2$ . Поскольку атомы гелия имеют малый дипольный момент, то взаимодействие Ван-дер-Ваальса между атомами пренебрежимо мало, и газообразный гелий

является практически идеальным газом с очень низкой температурой конденсации. При атмосферном давлении температура кипения жидкого  ${}^3\text{He}$  равна 3,34 К (4,2 К у  ${}^4\text{He}$ ).

Ядерный спин у  ${}^4\text{He}$  равен нулю, так что атомы  ${}^4\text{He}$  образуют либо бозе-газ, либо бозе-жидкость. Спин ядра у  ${}^3\text{He}$  равен 1/2, и атомы  ${}^3\text{He}$  являются фермионами и подчиняются статистике Ферми-Дирака.

Благодаря малости массы атомов и слабости их взаимодействия, длина волны де-Бройля  $\lambda = h/mv$  при температурах порядка 1 К сравнима с межатомным расстоянием атомов в жидкости. Поэтому жидкие  ${}^4\text{He}$  и  ${}^3\text{He}$  являются чисто квантовыми объектами – **квантовыми жидкостями**, которые не замерзают при охлаждении до самых низких температур.

**Решение.** Концентрация атомов в жидком гелии равна  $n = \rho / m_{\text{He}} = 1,62 \cdot 10^{26} \text{ кг/м}^3$ . Используя зависимость энергии Ферми от концентрации ферми-частиц:  $E_F = \hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3} / (2m_0)$ , получаем значение энергии Ферми:

$$\begin{aligned} E_F &= \frac{\hbar^2}{2m_{\text{He}}} \left( 3\pi^2 \frac{\rho}{m_{\text{He}}} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2 N_A}{2M} \left( 3\pi^2 N_A \frac{\rho}{M} \right)^{2/3} = \\ &= \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 6 \cdot 10^{23}}{2(4 \cdot 10^{-3})} \left( 3\pi^2 6 \cdot 10^{23} \frac{81}{4 \cdot 10^{-3}} \right)^{2/3} \approx 4,2 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}, \end{aligned}$$

и температуры вырождения  $T^* = E_F / k_B \approx 3 \text{ К}$ .

$$\textbf{Ответ.} \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m_{\text{He}}} \left( 3\pi^2 \frac{\rho}{m_{\text{He}}} \right)^{2/3} \approx 4,2 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} = 2,6 \cdot 10^{-4} \text{ эВ},$$

$$T^* = E_F / k_B \approx 3 \text{ К}.$$

**Задача 7.5.** Показать, что в металле при  $T = 0 \text{ К}$  средняя энергия в расчете на один валентный электрон равна  $\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F$ .

**Решение.** Число электронов  $dN(p)$  с импульсом в интервале  $(p, p+dp)$  равно удвоенному (за счет спина) числу электронных состояний в сферическом слое толщины  $dp$ :

$$dN(p) = 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3 / V_K},$$

где  $V_K$  — объем кристалла,  $(2\pi\hbar)^3 / V_K$  — величина объема одного элементарного квантового состояния.

Таким образом, суммарная кинетическая энергия всех  $N$  электронов, заполняющих при  $T = 0$  К сферу радиуса  $p_F$ , равна:

$$E_N = \int \frac{p^2}{2m} dN(p) = \int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m} 2 \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3 / V_K} = \frac{3}{5} N E_F(0),$$

$$\text{где } E_F(0) = \frac{p_F^2}{2m}, \quad N = 2 \frac{(4/3)\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3 / V_K}.$$

На один валентный электрон приходится в среднем энергия, равная  $3E_F / 5$ .

В отличие от классической механики, когда средняя энергия одной частицы определяется температурой  $E_1 = 3k_B T / 2$ , и при  $T = 0$  К равна нулю ( $E_1(0) = 0$ ), кинетическая энергия электронного ферми-газа даже при нулевой температуре отлична от нуля. В среднем на один валентный электрон приходится энергия, равная  $3E_F / 5$ .

**Ответ.**  $\langle E \rangle = 3E_F / 5$ .

**Задача 7.6.** Вычислить энергию Ферми и максимальную скорость электронов в меди, считая, что на один атом приходится один свободный электрон. Плотность меди  $\rho = 8,9$  г/см<sup>3</sup>.

**Решение.** Используем формулу (6.24) для энергии Ферми

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3}, \text{ где } m_0 \text{ — масса электрона. Концентрацию}$$

электронов  $n$  можно выразить через концентрацию атомов металла  $N / V_K$ :  $n = z N / V_K$ , где  $z = 1$  — валентность меди,  $N$  — полное число атомов в объеме кристалла  $V_K$ . Концентрация атомов вещества свя-

зана с его плотностью:  $\frac{N}{V_K} = \frac{\rho}{m} = \frac{\rho}{M / N_A}$ , где  $m$  — масса одного атома,  $M$  — молярная масса вещества,  $N_A$  — число Авогадро.



Таким образом, находим выражение для энергии Ферми через плотность вещества, его молярную массу и валентность:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 3\pi^2 n \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 3\pi^2 N_A \frac{z \cdot \rho}{M} \right)^{2/3}.$$

Учитывая численные значения фундаментальных физических постоянных, в единицах системы СИ:

$$E_F \approx 4,15 \cdot 10^{-22} (z\rho / M)^{2/3}.$$

В частности, для меди

$$\begin{aligned} E_F(\text{Cu}) &\approx 4,15 \cdot 10^{-22} (z\rho / M)^{2/3} = \\ &= 4,15 \cdot 10^{-22} \left( \frac{8,9 \cdot 10^3}{63,55 \cdot 10^{-3}} \right)^{2/3} \approx 1,12 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} \approx 7 \text{ эВ}. \end{aligned}$$

Для меди температура вырождения электронного газа  $T^* = E_F(\text{Cu})/k_B \approx 80000 \text{ К}$ , т. е. газ остается вырожденным вплоть до температуры плавления.

Максимальной скоростью обладают электроны, имеющие энергию, равную энергии Ферми. Для электрона в меди имеем  $v_{\max} = \sqrt{2E_F / m_0} \approx 1,6 \cdot 10^6 \text{ м/с}$  (даже при 0 К скорость этих электронов только на три порядка меньше скорости света!).).

$$\text{Ответ: } E_F(\text{Cu}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 3\pi^2 N_A \frac{z \cdot \rho}{M} \right)^{2/3} \approx 1,12 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} \approx 7 \text{ эВ},$$

$$v_{\max} = \sqrt{2E_F / m_0} \approx 1,6 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

### §7.3. Бозе-частицы. Функция распределения Бозе–Эйнштейна

Рассмотрим квантовый осциллятор с собственной частотой  $\omega$ . Энергетический спектр осциллятора (см. (3.55), задача 3.11, а также приложение 4.2)

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (7.14)$$

Энергия квантового осциллятора (или значение квантового числа  $n$ ) определяется только температурой термодинамической системы, в которой он находится. При  $T = 0 \text{ К}$  осциллятор находит-

ся на нулевом квантовом уровне ( $n = 0$ ), а при  $T \neq 0$  К осциллятор может находиться в любом возбужденном состоянии (при любом  $n$ ). Вероятность  $w_n$  нахождения осциллятора на  $n$ -м уровне возбуждения описывается **законом Гиббса**:

$$w_n = A \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) = A \exp\left(-\frac{(n+1/2) \cdot \hbar \omega}{k_B T}\right), \quad (7.15)$$

где  $k_B$  – константа Больцмана.

Энергетический спектр квантового осциллятора эквидистантный. Этот факт позволяет описать возбуждение осциллятора, как рождение квантов возбуждения (рис. 7.2). Причем все кванты возбуждения осциллятора идентичны и имеют энергию  $\hbar \omega$ . Если осциллятор находится на  $n$ -м



Рис. 7.2. Нахождение квантового осциллятора на  $n$ -м уровне (на рис.  $n = 3$ ) возбуждения с энергией  $E_n = \hbar \omega (n + 1/2)$  соответствует рождению  $n$  квантов, каждый из которых имеет энергию  $\hbar \omega$ .

осциллятор находится на  $n$ -м уровне возбуждения, то можно говорить о рождении  $n$  квантов возбуждения (см. рис. 7.2 при  $n = 3$ ). Поскольку энергии квантов одинаковы, то все  $n$  квантов находятся в одном энергетическом состоянии с одной энергией  $\hbar \omega$ . Так как принципиально возможно  $n \rightarrow \infty$ , то число квантов возбуждения в одном состоянии не лимитировано, в отличие от ферми-частиц. Такие частицы (как кванты возбуждения осциллятора) относятся к **бозе-частицам**.

**Задача 7.7.** Найдите функцию распределения бозе-частиц, определяющую среднее число квантов возбуждения  $\langle n \rangle$  квантового осциллятора, находящегося в термодинамической системе при температуре  $T$ . Циклическая частота осциллятора  $\omega$ .

**Решение.** Вероятность  $w_n$ , с которой квантовый осциллятор с частотой  $\omega$  находится на  $n$ -м энергетическом уровне, то есть вероятность возбуждения  $n$  квантов, согласно статистической термодинамике описывается распределением Гиббса (7.15). Постоянная  $A$

находится из условия нормировки  $\sum_{n=0}^{\infty} w_n = 1$ . Вычисляя сумму

$\sum_{n=0}^{\infty} w_n$ , как сумму геометрической прогрессии, получаем:

$$A = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)\right]$$

и

$$w_n = \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)\right) \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}\right). \quad (7.16)$$

Для среднего (равновесного при температуре  $T$ ) числа возбужденных квантов с энергией  $\hbar\omega$  по формуле средних значений имеем

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot w_{n,\omega} = \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)\right) \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot \exp\left(-n \frac{\hbar\omega}{k_B T}\right).$$

При вычислении суммы используем математический прием: вводим переменную  $\hbar\omega/(k_B T)$ ; представляем функцию под знаком суммы как производную по этой переменной и меняем местами суммирование и взятие производной. В результате получаем

$$\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-d}{d[\hbar\omega/(k_B T)]} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} = \frac{-d}{d[\hbar\omega/(k_B T)]} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}.$$

После вычисления суммы и взятия производной имеем

$$\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} = \frac{\exp\left[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right]}{\left[1 - \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right]\right]^2}.$$

Окончательно для  $\langle n \rangle$  находим:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1}. \quad (7.17)$$

Зависимость (7.17) для среднего числа квантов возбуждения от температуры и энергии кванта определяет **функцию распределения** (статистику) **Бозе–Эйнштейна** для частиц, число которых в любом квантовом состоянии ничем не ограничено.

**Замечание.** В общем случае функция распределения Бозе–Эйнштейна имеет вид:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp \frac{E - \mu}{k_B T} - 1}, \quad (7.18)$$

где  $\langle n \rangle$  – среднее число частиц при температуре  $T$  в состоянии с энергией  $E$ ,  $\mu$  – термодинамический химический потенциал, определяемый величиной изменения полной внутренней энергии системы  $U$  при изменении числа частиц  $N$  в системе:  $\mu = \partial U / \partial N$ .

К интересным свойствам бозе-системы можно отнести явление бозе-конденсации (см. приложение 7.1).

**Ответ:**  $\langle n \rangle = \left( \exp \frac{\hbar \omega}{k_B T} - 1 \right)^{-1}.$

### Приложение 7.1. Бозе-конденсация

Важной особенностью распределения Бозе–Эйнштейна является то, что если одна бозе-частица в результате какого-либо взаимодействия рассеивается в некоторое состояние, то вероятность рассеяния второй бозе-частицы, идентичной первой, на другом рассеивателе в то же самое состояние в два раза больше по сравнению с вероятностью рассеяния неидентичных частиц.

Если имеются  $N$  тождественных бозе-частиц в некотором состоянии, то *вероятность того, что еще одна частица придет в то же самое состояние, увеличивается в  $(N + 1)$  раз по сравнению с той вероятностью, которая имела бы место, если бы все рассматриваемые частицы были бы неидентичными.*

Это явление подобно интерференции  $N$  когерентных волн с одинаковой амплитудой и интенсивностью  $I_0$ , когда напряженность результирующего поля пропорциональна числу волн, а интенсивность  $N^2 I_0$  возрастает по сравнению с интенсивностью одной волны в  $N^2$  раз. Тогда добавление еще одной волны приводит к интенсивности  $(N + 1)^2 I_0$ . Если бы рассматриваемые волны были некогерентны, то интенсивность была бы  $(N + 1)I_0$ . Таким образом, как и в

случае с бозе-частицами, добавление одной волны к уже имеющимся  $N$  когерентным волнам приводит к росту интенсивности в  $(N + 1)$  раз в отличие от сложения некогерентных волн.

Этот эффект лежит в основе явления **бозе-конденсации**.

При  $T = 0$  К среднее число возбужденных квантов осциллятора  $\langle n \rangle = 0$  (7.17) и все бозе-частицы скапливаются на наиболее низком энергетическом уровне (рис. 7.3 а). Для системы квантовых осцилляторов этот уровень соответствует нулевым колебаниям осциллятора ( $n = 0$ , энергия  $E_0 = \hbar\omega/2$  (7.14)). Заметим, что для других систем бозе-частиц расположение энергетических уровней может быть неэквидистантным, но это не меняет характера распределения частиц при  $T = 0$  К. В любом случае частицы находятся на самом низком уровне и образуют так называемый **бозе-конденсат**.

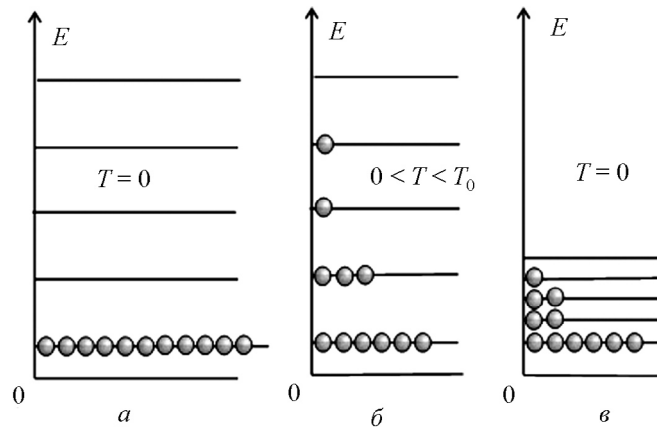


Рис. 7.3. Заполнение энергетических уровней в газе бозе-частиц (квантовых осцилляторов): а — все частицы находятся на самом низком энергетическом уровне при температуре  $T = 0$  К; б — при температурах ниже температуры вырождения  $T_0$  заполняются возбужденные состояния, хотя большая часть частиц все еще находится в низшем энергетическом состоянии; в — истощение конденсата при  $T = 0$  К с переходом частиц на виртуальные уровни энергии.

С ростом температуры начинают заполняться более высокие энергетические состояния системы. Однако при температурах ниже температуры вырождения ( $0 < T < T_0$ ) большая часть частиц остается на низшем энергетическом уровне. Это связано с тем, что пока частиц в основном состоянии много больше, чем в возбужденных состояниях, вероятность перехода частиц в основное состояние намного превышает вероятность их перехода в возбужденное состоя-

ние, и большинство частиц продолжает оставаться на низшем уровне, образуя бозе-конденсат. В отличие от конденсации паров при сжижении газа, *бозе-конденсация происходит в импульсном пространстве*. При этом переход в самое низкое энергетическое состояние (конденсацию) можно рассматривать как переход от беспорядка к порядку в импульсном пространстве. На рис. 7.3 б схематически показано заполнение энергетических уровней бозе-частицами при температурах ниже температуры вырождения ( $0 < T < T_0$ ).

Выше температуры вырождения число частиц на низшем энергетическом уровне мало и частицы описываются классической статистикой Максвелла–Больцмана.

Для идеального бозе-газа температура вырождения может быть оценена по формуле

$$T_0 \approx \frac{3,31 \hbar^2}{m k_B} \left( \frac{n}{2s+1} \right)^{2/3}, \quad (7.19)$$

где  $m$  – масса бозе-частицы,  $s$  – ее спин, а  $n$  – концентрация бозе-частиц.

Наличие взаимодействия (сил отталкивания) в бозе-системах приводит к тому, что конденсация всех частиц на низшем энергетическом уровне может стать не выгодной даже при температуре  $T = 0$  К. Большая плотность частиц в одном состоянии приводит к увеличению потенциальной энергии взаимодействия. В результате устанавливается равновесное распределение, когда часть частиц переходит в более высокие *виртуальные энергетические состояния*, происходит “**истощение конденсата**” (рис. 7.3 в). При этом увеличение кинетической энергии компенсируется выигрышем в потенциальной энергии.

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D7.1.** Используя приближенную формулу  $\mu \cong E_F \left[ 1 - (\pi^2/12)(k_B T/E_F)^2 \right]$ , описывающую зависимость химического потенциала от температуры, получите выражение для функции распределения Ферми–Дирака  $f(E)$  для заданной температуры и оцените, во сколько раз изменится вероятность какого-либо

состояния с энергией  $E_F = 0,2$  эВ при уменьшении температуры от  $T_1 = 400$  К до  $T_2 = 200$  К.

**Ответ.** 
$$f(E) = \left[ 1 + \exp \left\{ \frac{E}{k_B T} - \frac{E_F}{k_B T} \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right) \right\} \right]^{-1},$$

$$\frac{f(T_2)}{f(T_1)} \approx \frac{1 + \exp(\pi^2/140)}{1 + \exp(\pi^2/70)} \approx 0,96.$$

**Задача D7.2.** Оценить, при какой концентрации электронный газ в полупроводнике можно считать невырожденным? Температура  $T_0 = 300$  К.

**Ответ.** Считая температуру вырождения равной  $T_0$ , для энергии Ферми имеем  $E_F = k_B T_0 = 4,14 \cdot 10^{-21}$  Дж =  $2,6 \cdot 10^{-2}$  эВ. Концентрацию оценим по формуле (10.3) для вырожденного газа:

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left[ \frac{2m_0 E_F(0)}{\hbar^2} \right]^{3/2} = 2,4 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}.$$

**Примечание.** В полупроводниках как электронный, так и дырочный газ не вырождены при температурах значительно меньших, чем ширина энергетической щели:  $k_B T \ll E_g = E_c - E_v$ .

**Задача D7.3.** Сравните среднее значение  $\sqrt{E}$  в расчете на один электрон, для вырожденного и невырожденного электронного газа при температуре  $T$ , полагая плотность состояний равной  $\rho(E) = \sqrt{E} (\sqrt{2} m^{3/2}) / (\pi^2 \hbar^3)$ . Химический потенциал  $\mu$ . В случае вырожденного газа воспользоваться линейной аппроксимацией ступеньки Ферми и приближением  $k_B T \ll \mu$ .

**Ответ.** Для вырожденного ферми-газа

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \int_0^\infty \sqrt{E} \rho(E) f(E) dE &= \\ &= \frac{3}{2\mu^{3/2}} \left[ \int_0^{\mu-2k_B T} E dE + \frac{1}{4k_B T} \int_{\mu-2k_B T}^{\mu+2k_B T} E(\mu+2k_B T-E) dE \right] \approx \frac{3}{4} \sqrt{\mu}; \end{aligned}$$

для невырожденного электронного газа

$$\frac{1}{n} \int_0^\infty \sqrt{E} \rho(E) f(E) dE = \frac{3}{2\mu^{3/2}} \int_0^\infty E \exp\left[\frac{\mu - E}{k_B T}\right] dE = \frac{3(k_B T)^2}{2\mu^{3/2}},$$

где

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left[ \frac{2m_0\mu}{\hbar^2} \right]^{3/2}.$$

**Задача D7.4.** Выврожденный электронный газ с энергией Ферми  $E_F$  находится при температуре  $T = 0$  К. Какие длины волн де Бройля соответствуют значениям плотности вероятности  $f(\lambda)$  распределения электронов по длинам волн де Бройля, которые больше половины от максимального значения  $f_m$ . Сравните функции распределения по длинам волн де Бройля для вырожденного и невырожденного газов (задача D2.2).

**Ответ.**  $f(\lambda) = 8\pi/\lambda^4$ . Вероятности  $> f_m/2$  соответствуют длины волн от  $\lambda_{E_F} = \pi\hbar\sqrt{\frac{2}{mE_F}}$  до  $\lambda_{1/2} = \sqrt{2}\pi\hbar\sqrt{\frac{2}{mE_F}} \approx 1,2\lambda_{E_F}$ .



## Глава 8

ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА.  
ФОНОНЫ

## §8.1. Колебательные движения атомов в кристалле

Кристалл, представляющий собой ансамбль сильно связанных атомов, расположенных в узлах кристаллической решетки, является сложной колебательной системой. Характерно, что спектр колебаний кристалла и каждого атома определяется всей системой связанных атомов.

1. *По аналогии с непрерывной упругой средой* спектр колебаний можно представить в виде дискретного набора стоячих волн (**нормальных колебаний**).

2. При рассмотрении высокочастотных колебания в кристалле следует учесть, что кристалл уже нельзя аппроксимировать сплошной средой. Следует учесть, что он состоит из атомов, расположенных на определенных расстояниях. Если  $a$  — межатомное расстояние в одномерной цепочке атомов, то минимальная длина волны возбуждений такого кристалла  $\lambda_{\min} = 2a$ . Более коротких волн в цепочке атомов возбуждаться не может. Максимальная длина волны нормальных колебаний определяется размером кристалла  $L$  и равна  $\lambda_{\max} = 2L$ , где  $L$  — длина кристалла. Таким образом, одномерная цепочка одинаковых атомов характеризуется следующим набором длин волн нормальных колебаний:  $\lambda = 2L, 2L/2, 2L/3, 2L/4 \dots 2a$ .

Волна с  $\lambda_{\max} = 2L$  называется **основной модой**. **Мода** — это нормальное колебание в распределенной колебательной системе, характеризующееся определенной частотой, направлением волнового вектора и поляризацией.

3. Каждое нормальное колебание характеризуется определенной частотой, с которой осциллируют все элементы системы. Набору длин волн от  $\lambda_{\max} = 2L$  до  $\lambda_{\min} = 2a$  соответствует **дискретный набор частот от минимальной  $\omega_{\min}$  до максимальной  $\omega_{\max}$  частоты**:  $\omega_{\min}, 2\omega_{\min}, 3\omega_{\min}, \dots, \omega_{\max}$ .

4. В системах, состоящих из  $N$  связанных атомов, **число нормальных колебаний** равно числу атомов в системе. Так для одно-

мерной цепочки атомов:  $2L/(2a) = Na/a = N$ . Совокупность нормальных колебаний обладает **свойством полноты**: произвольное свободное движение колебательной системы может быть представлено в виде суперпозиции колебаний с нормальными частотами (задача 1.6). При этом полная энергия движения элементов системы является суммой энергий нормальных колебаний.

5. Переходя *от классического* рассмотрения *к квантовому*, будем рассматривать каждую моду нормальных колебаний как квантовый гармонический осциллятор. Таким образом, собственную энергию движения атомов в кристалле можно представить в виде суммы энергий независимых гармонических осцилляторов с разными частотами, соответствующими набору частот нормальных колебаний кристаллической решетки.

Энергия осциллятора в квантовой механике квантуется и описывается формулой (задача 4.7)

$$E_{n,\omega} = \hbar\omega(n + 1/2), \quad (8.1)$$

где  $\omega$  — частота нормального колебания,  $n$  — целое неотрицательное число. Возбужденным состояниям осциллятора соответствуют значения  $n = 1, 2, 3 \dots$ . При  $n = 0$  осциллятор находится в основном, невозбужденном состоянии.

## §8.2. Основное состояние кристаллических структур. Нулевые колебания

Энергия основного состояния осциллятора  $E_0 = \hbar\omega/2$  не является тепловой энергией. Её природа имеет чисто квантовомеханический характер, связанный с соотношением неопределенностей Гейзенберга  $\delta p \cdot \delta x \sim \hbar$  ( $\delta p$  и  $\delta x$  — неопределенности импульса и координаты частицы соответственно), из которого следует, что частица даже при температуре абсолютного нуля ( $T = 0$  К) не может находиться в состоянии покоя, то есть иметь точно определенные координаты. Принято говорить, что частица при  $T = 0$  К совершает нулевые колебания с некоторой амплитудой  $x_0$  и нулевой энергией  $\hbar\omega/2$ .

*Амплитуду нулевых колебаний* можно оценить, используя принцип соответствия между квантовомеханическим и классическим выражениями для энергии. Это утверждение требует уточне-

ния. Под гармоническим осциллятором в классической механике обычно понимается система с сосредоточенными параметрами, обладающая инертностью, положением равновесия, при отклонении от которого возникают возвращающие силы, пропорциональные величине отклонения. Мы рассматриваем упругую плоскую стоячую волну с частотой  $\omega$  и соответствующей ей длиной волны  $\lambda \sim 1/\omega$ . В стоячей волне *аналогом колебательной системы* с сосредоточенными параметрами может служить каждый **участок волны длиной  $\lambda/4$**  (от узла смещений до узла деформаций) (задача 1.7, рис 1.10). Энергия этого участка среды не изменяется с течением времени, а лишь периодически (с периодом равным четверти периода колебаний  $T/4$ ) переходит из потенциальной в кинетическую и обратно. Поэтому в данном случае, для оценки, можно сравнить энергию квантового осциллятора  $\hbar\omega/2$  с энергией такого участка стоячей волны.

Средние значения плотности  $\varepsilon$  кинетической и потенциальной энергии в классической упругой волне совпадают и выражаются формулой  $\langle \varepsilon_{\text{кин}} \rangle = \langle \varepsilon_{\text{пот}} \rangle = (1/4)\rho_m x_0^2 \omega^2$ , где  $\rho_m$  – плотность среды,  $x_0$  – амплитуда волны. Плотность полной энергии в 2 раза больше:

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon_{\text{кин}} \rangle + \langle \varepsilon_{\text{пот}} \rangle = (1/2)\rho_m x_0^2 \omega^2.$$

Энергия, приходящаяся на область  $\lambda/4$ ,

$$\langle E \rangle = \frac{1}{4}\rho_m x_0^2 \omega^2 \cdot \frac{\lambda}{4} \cdot S.$$

Здесь  $S$  – сечение кристалла, а  $(\lambda/4) \cdot S$  – объем кристалла в области между соседними узлами смещений и деформаций в волне.

Поскольку  $\lambda \sim 1/\omega$ , то  $\langle E \rangle \sim \rho_m x_0^2 \omega$ . Приравнявая  $\hbar\omega/2 = \langle E \rangle$ , находим, что *амплитуда нулевых колебаний атомов решетки, не зависит от длины волны нормальных колебаний* и, соответственно, на всех частотах  $\omega$  одинакова. Численная оценка амплитуды нулевых колебаний дана ниже в задаче 8.1.

### §8.3 Возбужденное состояние кристалла. Температура Дебая

При  $T \neq 0$  К кристалл находится в **возбужденном состоянии**. Энергетическое состояние кристалла, описываемое набором квантовых чисел  $n$  для каждой моды нормальных колебаний (7.18), за-

висит от температуры. При повышении температуры в первую очередь возбуждаются низкочастотные колебания. В кристалле размером  $\sim 1$  см минимальная частота составляет  $\approx (10^4 \div 10^5)$  Гц и квант энергии  $\hbar\omega_{\min}$  возбуждается уже при температуре  $T \approx \hbar\omega_{\min}/k_B \approx 10^{-6}$  К.

При дальнейшем повышении температуры происходят *два процесса*. С одной стороны, увеличивается число возбужденных мод нормальных колебаний решетки (увеличивается число частот, удовлетворяющих условию  $\hbar\omega < k_B T$  (задача 7.7)), а с другой стороны, одновременно увеличивается число возбужденных квантов энергии  $n$  у каждой моды (7.18). При температуре

$$T_D \approx \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B}, \quad (8.2)$$

определяемой максимальной частотой квантового осциллятора, соответствующей  $\lambda_{\min} = 2a$ , возбуждаются моды колебаний со всеми возможными частотами. Эта температура называется **температурой Дебая**. При дальнейшем повышении температуры число возбужденных мод не изменяется, а увеличивается только энергия, которую несет каждая мода, то есть число  $n$  (7.18) возбужденных квантов с разными частотами. **Температура Дебая имеет порядок  $\sim (100 \div 500)$  К.** Таким образом, энергия одного кванта  $\hbar\omega_j$  для разных мод  $\omega_j$  изменяется в широком диапазоне от  $10^{-6} k_B$  до  $(100 \div 500) k_B$  (т. е. от  $10^{-6}$  до  $(100 \div 500)$  К).

Температура Дебая разделяет шкалу температур на две области: низкотемпературную, где возбуждены не все частоты спектра колебаний решетки, и высокотемпературную, где возбуждены все частоты. Деление это условно, поскольку переход от одной области к другой в трехмерном кристалле не является резким.

На рис. 8.1 представлены зависимости энергии квантового осциллятора  $E_n(\omega)$  от его частоты  $\omega$  для разного числа возбужденных квантов  $n$ . Вертикальные штриховые прямые соответствуют разрешенным значениям частот  $\omega_j$  (соответственно, длинам волн  $\lambda_j$ ).

При  $T = 0$  К в спектре присутствуют только нулевые колебания, энергия которых соответствует точкам на пересечении зависимости при  $n = 0$  и штриховых вертикальных линий.

При повышении температуры появляются кванты тепловых возбуждений, причем большее число квантов возбуждений приходится на долю низкочастотных колебаний. Возбужденным при температуре  $T = T^*$  квантам энергии соответствуют те точки пересечения линейных зависимостей  $E_n(\omega)$  для разных  $n$  и вертикальных штриховых линий, которые расположены ниже горизонтальной прямой  $E = k_B T^*$  на рис. 8.1, то есть энергия которых меньше  $k_B T^*$ . Например, при температуре  $T^*$  возбуждены колебания с частотами  $\omega < \omega^*$ , а более высокочастотные колебания практически отсутствуют (кроме нулевых). При температуре Дебая  $T_D$  в кристалле возбуждаются колебания со всеми возможными частотами. Дальнейшее повышение температуры приводит только к увеличению числа возбужденных квантов на каждой частоте, т. е. к росту энергии каждой моды колебаний.

Итак, размер кристалла (в одномерном случае — длина цепочки атомов  $L$ ) определяет длины волн  $\lambda_j$  возбуждений. Энергия возникающего возбуждения (моды с волновым вектором  $\mathbf{q}_j$ ) на длине  $\lambda_j$  зависит от числа квантов возбуждений  $n$  на этой длине волны. Число квантов  $n$  (8.18) связано с величиной возбуждающего фактора, например, с температурой. Энергия одного кванта  $\hbar\omega = \hbar\omega(q)$  зависит как от  $\lambda_j$ , так и от параметров решетки. Эта зависимость (закон дисперсии) может быть определена *только при рассмотрении динамики распространения возбуждений в кристалле* (см. ниже задачу 8.4).

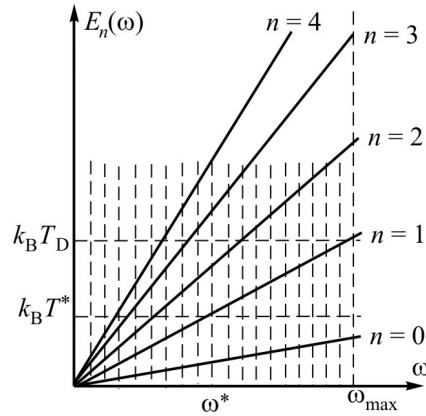


Рис. 8.1. Зависимость энергии квантового осциллятора  $E_n(\omega)$  от частоты при различных числах  $n$  возбужденных квантов.

#### §8.4. Фононы — кванты возбуждений

Переход системы атомов решетки в возбужденное состояние описывался выше как возбуждение квантов нормальных колебаний.

Нормальные колебания – это стоячие волны, групповая скорость которых равна нулю. В этой модели квант энергии нельзя принять за квазичастицу с определенным импульсом, поскольку равенство нулю скоростей квазичастиц не позволяет рассматривать динамику тепловых возбуждений в решетке. Чтобы приписать энергетическим возбуждениям определенный импульс, заменим каждую стоячую волну двумя бегущими навстречу друг другу звуковыми волнами, удовлетворяющими циклическим граничным **условиям Борна–Кармана** (6.1): на границах кристалла комплексные амплитуды волн имеют одно и то же значение (см. задачу 6.1).

В отличие от нормальных мод, бегущие звуковые волны в кристалле, имеют отличную от нуля скорость распространения  $V_s$ . Причем для длинноволновых колебаний ( $\lambda \gg a$ ) справедлив линейный закон дисперсии:

$$\omega = V_s q, \quad (8.3)$$

из которого следует, что длина волны  $\lambda$  связана с частотой  $\omega$  соотношением:  $\lambda = 2\pi V_s / \omega$ , где  $q = 2\pi / \lambda$  — волновое число.

Для одномерной цепочки атомов длины  $L$  с периодом  $a$  замена стоячих волн бегущими проводится по следующей схеме.

| Стоячие волны                            |               | Бегущие волны                                |
|------------------------------------------|---------------|----------------------------------------------|
| $\lambda_1 = 2L,$                        |               |                                              |
| $\lambda_2 = 2L/2,$                      | $\Rightarrow$ | $\lambda_1 = L,$                             |
| $\lambda_3 = 2L/3,$                      |               |                                              |
| $\lambda_4 = 2L/4,$                      | $\Rightarrow$ | $\lambda_2 = L/2,$                           |
| $\lambda_5 = 2L/5,$                      |               |                                              |
| $\lambda_6 = 2L/6,$                      | $\Rightarrow$ | $\lambda_3 = L/3,$                           |
| .....                                    |               |                                              |
| $\lambda_N = 2L/N = 2a = \lambda_{\min}$ | $\Rightarrow$ | $\lambda_{N/2} = 2L/N = 2a = \lambda_{\min}$ |
|                                          |               |                                              |
| $\lambda_j = 2L/j,$                      | $\Rightarrow$ | $\lambda_i = L/i,$                           |
| $j = 1, 2, 3, \dots, N;$                 |               | $i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2,$          |

Здесь  $N = L/a$  — число атомов в цепочке.

Обратим внимание на то, что при таком переходе число волн с различными  $\lambda$  уменьшилось в два раза, но зато теперь каждому значению  $\lambda_j$  стало соответствовать две волны с волновыми векторами  $+\mathbf{q}_j$  и  $-\mathbf{q}_j$ , так что полное число волн (равное числу степеней свободы) осталось прежним.

Введенные бегущие волны, как и нормальные колебания в сплошных средах, характеризуются дискретным набором волновых чисел :

$$q_i = \frac{2\pi}{\lambda_i} = \frac{2\pi}{L} i, \quad (i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2). \quad (8.4)$$

Кроме того, учет дискретности кристаллических структур (в отличие от сплошных сред указывает на *наличие максимального значения* волнового числа  $q$ , соответствующего минимальной длине волны ( $i = N/2$ ). В одномерном случае максимальное значение волнового числа равно  $\pm \pi/a$ . Таким образом, в одномерном случае все возможные значения волнового числа находятся в интервале

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}, \quad (8.5)$$

то есть на отрезке значений волновых векторов  $2\pi/a$ .

Теперь, в соответствии с принципом корпускулярно-волнового дуализма, можно бегущую волну с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и частотой  $\omega$  представить как совокупность частиц — квантов, каждый из которых имеет энергию

$$E = \hbar\omega \quad (8.6)$$

и обладает импульсом

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}. \quad (8.7)$$

Соотношения (8.6) и (8.7) аналогичны уравнениям Эйнштейна, определяющим элементарную частицу — фотон как квант электромагнитных волн. По аналогии с фотонами для элементарных возбуждений решетки Я.Б. Френкелем было предложено название **фонон**. Фононы — *квазичастицы*, описывающие коллективные возбуждения кристаллической решетки. Они введены теоретически для упругих сред, поэтому их не может быть вне такой среды.

Поскольку волновой вектор (и импульс) фонона может принимать только дискретные значения  $q_i$  с интервалом  $\Delta q_0 = 2\pi/L$ , то принято говорить, что фонон находится в состоянии с волновым вектором  $\mathbf{q}$ , а  $\Delta q_0 = 2\pi/L$  — *объем этого состояния* (в одномерном случае). В трехмерном случае объем одного состояния в  $\mathbf{q}$ -пространстве равен

$$\Delta q_0^3 = (2\pi/L)^3. \quad (8.8)$$

В одномерной цепочке атомов разрешенные значения волнового вектора эквидистантны (8.4), и число различных значений волнового вектора равно отношению длины интервала (8.5) к минимально возможному значению  $q_{\min} = 2\pi/L$  (8.4):

$$(2\pi/a)/(2\pi/L) = N.$$

**Полное число физически различных значений волнового числа всегда равно полному числу мод нормальных колебаний,** которое, в свою очередь, определяется **числом  $N$  атомов в решетке.** Это обстоятельство позволяет определить **предельное значение волнового числа** в трехмерном случае (одинаковое для продольных и поперечных волн).

Полное число возможных нормальных колебаний одинаковой поляризации в трехмерном случае равно:

$$\frac{(4/3)\pi q_{\max}^3}{(2\pi/L)^3} = N, \quad (8.9)$$

где  $(4/3)\pi q_{\max}^3$  — объем сферы в пространстве волновых векторов с предельным значением волнового вектора,  $(2\pi/L)^3$  (8.8) — объем квантового состояния в пространстве волновых векторов.

Отсюда получаем предельное значение волнового числа для фононов в трехмерном случае

$$q_{\max} = \left[ 6\pi^2 \frac{N}{L^3} \right]^{1/3}. \quad (8.10)$$

*Фононы являются бозе-частицами:* число фононов в одном состоянии (с заданной частотой и волновым вектором) не ограничено принципом запрета Паули и может быть сколь угодно большим.

Для фононов  $q_{\max}$  (8.10) вычисляется подобно  $p_F$  (6.23) для электронов металла. Однако максимальное значение импульса электронов в металле равно  $p_F$  только при  $T = 0$  К. При  $T \neq 0$  К электроны могут переходить в состояния с  $p > p_F$ . У фононов же состояний с  $q > q_{\max}$  не существует. С ростом температуры растет число фононов  $n$  в каждом возбужденном состоянии с  $q \leq q_{\max}$  (и увеличивается энергия этих мод (8.1)).



Среднее число фононов в каждом состоянии зависит только от температуры и от энергии фонона, то есть его частоты (распределение Бозе–Эйнштейна ((7.18), задача 7.7):

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}. \quad (8.11).$$

**Замечания.** 1. Область значений волнового числа (8.5) называется **первой зоной Бриллюэна** в одномерном случае (более подробно см. §9.4). Напомним, что волны с волновыми числами  $q = \pm\pi/a$ , соответствующими границам зоны Бриллюэна, испытывают брэгговское отражение.

2. Поскольку  $L \gg a$ , то объем  $q$ -состояния (8.8), характеризующий дискретность спектра, мал, и *спектр можно считать квазинепрерывным, а минимально возможное значение по модулю волнового вектора – равным нулю*. В этих условиях можно говорить о **законе дисперсии** фононов (зависимости частоты от волнового вектора  $\omega(q)$  (например, (8.3))), как о некоторой непрерывной функции волнового вектора  $\mathbf{q}$ .

3. При введении фононов использовалась следующая схема рассмотрения: нормальные колебания сплошной среды  $\rightarrow$  квантовый осциллятор  $\rightarrow$  система квазичастиц (фононов), описываемых уравнениями (8.6), (8.7), связывающими волновые и корпускулярные характеристики.

4. В уравнениях (8.1) и (8.11)  $n$  – это

- номер энергетического уровня возбуждения квантового осциллятора;
- число квантов возбуждения квантового осциллятора;
- число квазичастиц (фононов), обладающих энергией  $\hbar\omega$  и импульсом  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$  (результат сопоставления нормальные колебания  $\leftrightarrow$  квантовый осциллятор).

**Задача 8.1.** Учитывая независимость амплитуды **нулевых колебаний** от частоты, оцените абсолютное значение этой амплитуды, рассматривая колебания решетки с максимально возможной частотой  $\omega_{\max}$  ( $\lambda_{\min} = 2a$ ). При этом энергию нулевых колебаний можно положить равной классической механической энергии колебаний одного атома решетки. Масса атома решетки  $m$ .

**Решение.** В приближении задачи энергия нулевых колебаний равна классической механической энергии колебаний одного атома решетки

$$\frac{\hbar\omega_{\max}}{2} = \frac{m\omega_{\max}^2 x_0^2}{2}, \quad (8.12)$$

где  $m$  – масса атома.

Полагая  $\omega_{\max} \approx \sqrt{2\beta/m} = \omega_{\text{пар}}$ , где  $\omega_{\text{пар}}$  – парциальная частота, равная собственной частоте колебаний атома при закрепленных (неподвижных) соседях,  $\beta$  – упругая постоянная решетки, из формулы (8.2) находим амплитуду нулевых колебаний:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\max}}} = \left( \frac{\hbar^2}{2m\beta} \right)^{1/4}.$$

Для большинства металлов **максимальная частота** по порядку величины равна  $\omega_{\max} \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ .

Для меди  $m = \frac{M}{N_A} = \frac{64 \cdot 10^{-3}}{6 \cdot 10^{23}} \approx 10^{-25} \text{ кг}$ , амплитуда колебаний приблизительно равна

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\max}}} \approx \sqrt{\frac{10^{-34}}{10^{-25} \cdot 10^{13}}} = 10^{-11} \text{ м} = 0,1 \text{ Å}.$$

Межатомные расстояния составляют несколько ангстрем.

Амплитуда нулевых колебаний атомов возрастает при уменьшении их массы и уменьшении упругой постоянной  $\beta$ . При малых  $m$  и  $\beta$  она может быть порядка межатомных расстояний  $a$ . Таким образом, свойства кристаллической структуры должны зависеть от величины отношения  $x_0/a$ . При  $x_0/a \ll 1$  вероятность перескоков атомов из занимаемых ими положений, то есть вероятность делокализации, мала. Это условие выполняется практически для всех кристаллических решеток элементов периодической системы и их сплавов, за исключением гелия. Поэтому во всех веществах при  $T = 0 \text{ К}$  каждый атом можно считать локализованным в области пространства, значительно меньшей объема элементарной ячейки  $\sim a^3$ .

Жидкий гелий, для которого  $x_0/a \sim 1$ , является единственной в природе квантовой жидкостью, не замерзающей при нормальных давлениях вплоть до абсолютного нуля температур. Аналогичными

свойствами обладает его изотоп  $^3\text{He}$  (задача 7.4). При повышении давления  $\beta$  возрастает. При давлении  $\sim 25$  атмосфер жидкий гелий замерзает при  $T = 1$  К, образуя квантовый кристалл с гексагональной плотноупакованной решеткой. Квантовый кристалл сочетает свойства кристалла (имеет определенную кристаллическую структуру) и жидкости: если на пластинку кристаллического гелия положить металлический шарик, то через некоторое время шарик пройдет насквозь через пластинку, структура которой после этого восстановится до первоначальной.

Таким образом, в основном состоянии (при  $T = 0$  К) атомы кристалла совершают сложные периодические движения, спектр которых определяется спектром частот *всех мод* нормальных колебаний.

$$\text{Ответ. } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\max}}} = \left(\frac{\hbar^2}{2m\beta}\right)^{1/4}.$$

**Задача 8.2.** Оцените *вероятность возбуждения* одного, двух и трех квантов с максимальной частотой  $\omega_{\max}$  при температуре, равной температуре Дебая  $T_D$ , положив ее равной комнатной  $\approx 300$  К, что справедливо для большинства металлов.

**Решение.** Максимальная частота фононов определяется температурой Дебая:  $\hbar\omega_{\max} = k_B T_D$  (8.2).

Используя соотношение (7.17) для вероятности возбуждения  $n$  фононов при температуре  $T$ :

$$w_{\omega,n} = [1 - \exp(-\hbar\omega/(k_B T))] \cdot \exp(-n \cdot \hbar\omega/(k_B T)),$$

находим вероятность возбуждения при температуре Дебая  $n$  фононов (квантов) с максимальной частотой  $\omega_{\max} = k_B T_D / \hbar$ :

$$w_1 = (1 - e^{-1}) e^{-1} = 0,232 \quad (n = 1);$$

$$w_2 = (1 - e^{-1}) e^{-2} = 0,086 \quad (n = 2);$$

$$w_3 = (1 - e^{-1}) e^{-3} = 0,032 \quad (n = 3).$$

Таким образом, вблизи комнатной температуры, в среднем около 20% (точнее — 23,2%) атомов находятся на первом уровне возбуждения, соответствующем максимальной частоте  $\omega_{\max}$ , а около 80% атомов на этой частоте совершают только нулевые колебания.

При температуре  $T_D/2$  доля возбужденных атомов на максимальной частоте еще меньше и составляет  $\approx 12\%$ , при  $T_D/3 - \approx 5\%$ . Только при температуре  $1,4T_D$  вероятность возбуждения 1 кванта на частоте  $\omega_{\max}$  приближается к единице.

**Ответ.**  $w_1 = 0,232$ ;  $w_2 = 0,086$ ;  $w_3 = 0,032$ .

**Задача 8.3.** Найдите *среднюю энергию* одной *моды колебаний*, (волны, распространяющейся в определенном направлении с определенной поляризацией и частотой  $\omega$ ) при температуре  $T$ . Рассмотрите предельные случаи низких и высоких температур.

**Решение.** Используя выражение для среднего равновесного числа возбужденных квантов на частоте  $\omega$  при температуре  $T$  (распределение Бозе–Эйнштейна (8.11)), можно вычислить среднюю энергию колебательной моды (осциллятора) на частоте  $\omega$ :

$$\langle E_{\omega}^{full} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega + \langle n \rangle \cdot \hbar \omega = \frac{\hbar \omega}{2} + \hbar \omega \left( \exp \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right) - 1 \right)^{-1}. \quad (8.13)$$

Первое слагаемое в (8.13) – энергия нулевых колебаний, второе слагаемое – *средняя энергия тепловых колебаний* на данной частоте  $\omega$  при температуре  $T$ :

$$\langle E_{\omega} \rangle = \langle n \rangle \cdot \hbar \omega = \hbar \omega \left( \exp \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right) - 1 \right)^{-1}. \quad (8.14)$$

**В приближении низких температур** ( $T \ll \hbar \omega / k_B$  для моды с частотой  $\omega$ ) среднее число возбужденных квантов  $\langle n \rangle$  и их средняя тепловая энергия  $\langle E_{\omega} \rangle$  экспоненциально малы:

$$\langle n \rangle \approx \exp \left( -\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right); \quad E = \langle n \rangle \hbar \omega \approx \hbar \omega \cdot \exp \left( -\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right). \quad (8.15)$$

При **высоких температурах** ( $T \gg \hbar \omega / k_B$ , классическое приближение) среднее число возбужденных квантов и средняя энергия осциллятора пропорциональны температуре:

$$\langle n \rangle \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega}, \quad \langle E_{\omega} \rangle = \langle n \rangle \cdot \hbar \omega \approx k_B T. \quad (9816)$$

Таким образом, при низких температурах (когда  $k_B T$  меньше энергии кванта  $\hbar \omega$ ) волны на частотах  $\hbar \omega > k_B T$  практически не

возбуждаются (осцилляторы находятся на нулевом уровне возбуждения). При  $k_B T > \hbar\omega$  энергия моды колебаний (квантового осциллятора на частоте  $\omega$ ) приблизительно равна  $k_B T$ .

**Ответ.**  $\langle E_\omega \rangle = \hbar\omega \left( \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1 \right)^{-1}$ ; при  $T \ll \hbar\omega/k_B$

$E = \langle n \rangle \hbar\omega \approx \hbar\omega \cdot \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)$ , при  $T \gg \hbar\omega/k_B$   $E = \langle n \rangle \cdot \hbar\omega \approx k_B T$ .

### §8.5. Закон дисперсии фононов

**Задача 8.4. (Закон дисперсии фононов в одномерной цепочке идентичных атомов.)** Получите аналитическое выражение закона дисперсии фононов для простейшей модели одномерного кристалла: цепочки длиной  $L$ , составленной из периодически (с периодом  $a$ ) расположенных атомов массой  $M$ , связанных упругими пружинками с коэффициентом жесткости  $\beta$  (рис. 8.2). Определите групповую скорость фононов.

**Решение.** Для определения закона дисперсии фононов  $\omega(q)$  и скорости их движения  $d\omega/dq$  рассмотрим динамику распространения возмущений.

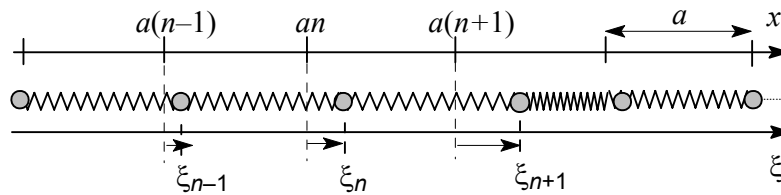


Рис. 8.2. Модель одномерного кристалла. На верхней оси штрихами показаны положения равновесия атомов; на нижней оси изображены атомы при их отклонении от положений равновесия:  $\xi_n$  — смещение  $n$ -го атома из положения равновесия  $x_n = an$ .

Запишем уравнение движения для  $n$ -го атома, учитывая действие на него в первом приближении только ближайших соседей:

$$M\ddot{\xi}_n = \beta(\xi_{n+1} - \xi_n) - \beta(\xi_n - \xi_{n-1}),$$

или

$$M\ddot{\xi}_n = \beta \sum_{i=\pm 1} (\xi_{n-i} - \xi_n), \quad (8.17)$$

где  $\xi_n$  — смещение  $n$ -го атома из положения равновесия  $x_n = an$ . Будем искать решение в виде бегущей волны:

$$\xi_n = A \exp[i(\omega t + qna)]. \quad (8.18)$$

Функция  $\xi_n$  должна удовлетворять условию цикличности (условию Борна–Кармана (6.1):

$$\xi(x) = \xi(x + L), \quad (8.19)$$

в соответствии с которым волновой вектор принимает дискретный набор значений

$$q_i = \frac{2\pi}{Na} i = \frac{2\pi}{L} i \quad (i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2), \quad (8.20)$$

который совпадает с набором волновых чисел (8.4), описывающих всевозможные возбуждения в одномерном кристалле.

Подставляя (9.18) в (9.17), для частоты колебаний атомов получаем

$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{qa}{2} = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{\pm qa}{2} = \omega_{\max} \sin \frac{\pm qa}{2}, \quad (8.21)$$

где  $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/M}$ .

Частота колебаний атома не зависит от его порядкового номера, а следовательно, все атомы колеблются с одной и той же частотой и амплитудой  $A$  (см. (8.18)), что соответствует распространению бегущих волн. Поскольку частота не может быть отрицательной, то знак  $\pm$  перенесен к волновому вектору и соответствует двум волнам, распространяющимся в противоположных направлениях. Зависимость  $\omega(q)$  (8.21) выражает **закон дисперсии акустической ветви продольных фононов** (рис. 8.3).

При низкочастотных колебаниях ( $\lambda \gg a$  или  $qa \ll 1$ ) закон дисперсии можно линеаризовать, разлагая (8.21) в ряд Тейлора по  $q$  до первого порядка:

$$\omega \approx \left( a \sqrt{\frac{\beta}{M}} \right) q, \quad (8.22)$$

что характерно для звуковых волн, распространяющихся в непрерывной упругой среде. Таким образом, при  $\lambda \gg a$  цепочка ведет себя

как непрерывная упругая нить, в которой звуковые волны распространяются со скоростью

$$V_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dq} = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}. \quad (8.23)$$

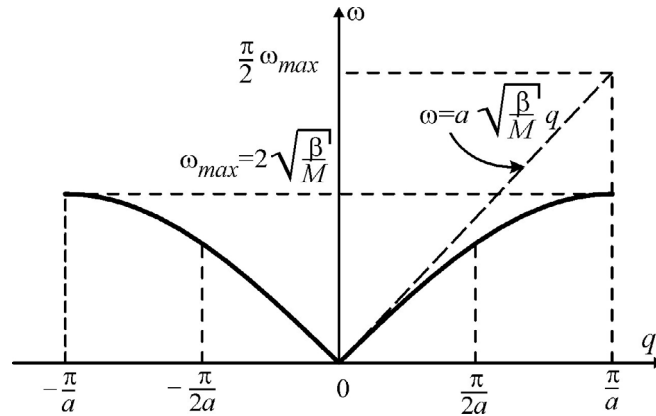


Рис. 8.3. Закон дисперсии  $\omega(q)$  акустической ветви продольных фононов для одномерной цепочки атомов (сплошная кривая) и линейный закон дисперсии звуковых волн в непрерывной среде (штриховая прямая).

**Групповая скорость** фононов равна градиенту частоты в пространстве волновых векторов:  $V_{\text{гр}} = d\omega/dq$ . Используя (9.21), для акустических фононов имеем

$$V_{\text{гр}}^{(ak)} = \pm a\sqrt{\frac{\beta}{M}} \cos \frac{qa}{2}. \quad (8.24)$$

Равенство нулю групповой скорости при  $q = \pm\pi/a$ , т. е. на границе зоны Бриллюэна (8.5), имеет наглядную интерпретацию, если рассматривать фононы как независимые и несвязанные с кристаллической структурой квазичастицы.

На первый взгляд такое предположение кажется некорректным, поскольку фононы не являются внешними частицами по отношению к решетке. Они «рождены» решеткой, являются результатом ее возбуждения. Однако описание колебательного движения (возбуждений системы) с помощью квазичастиц имеет то преимущество, что квазичастицы (фононы), после их введения (определения закона дисперсии), можно рассматривать как ансамбль само-

стоятельных частиц, движущихся в *неподвижной кристаллической структуре*, т. е. находящейся в основном, невозбужденном состоянии. Тогда фононы, как и другие микроскопические частицы, испытывают брэгговское отражение на границе зоны Бриллюэна при условии Вульфа–Брэггов  $q = \pm \pi/a$ . Условию  $q = \pm \pi/a$  (то

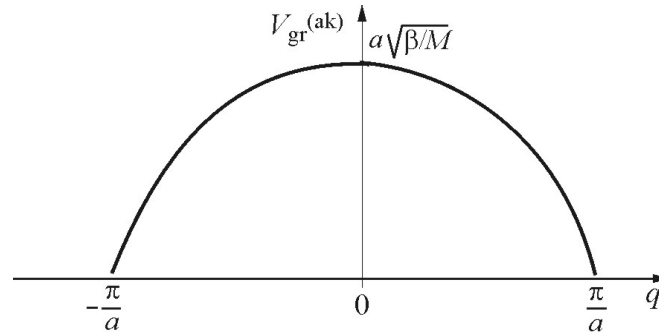


Рис. 8.4. Зависимость групповой скорости акустических фононов от волнового вектора в линейной цепочке атомов.

есть  $\lambda = 2a$ ) соответствуют колебания соседних атомов в противофазе:  $\Delta\varphi = qa = (\pi/a)a = \pi$ . Такие колебания представляют собой стоячую волну, которая не переносит энергии, ее групповая скорость равна нулю. Узел стоячей волны всегда находится посередине между атомами, а изменение амплитуды происходит по косинусоиду (рис. 8.5).

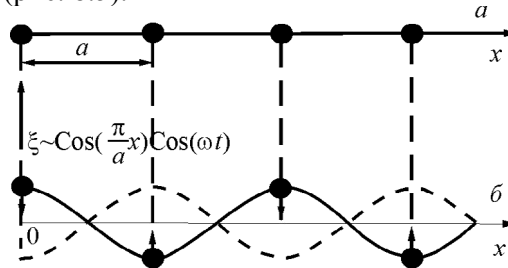


Рис. 8.5. Смещение атомов ( $b$ ) в линейной цепочке ( $a$ ) при возбуждении фононов с волновыми векторами  $q = \pm \pi/a$  ( $\lambda = 2a$ ).

**Ответ.**  $\omega = \omega_{\max} \sin \frac{\pm qa}{2}, \quad V_{gr}^{(ak)} = \pm \frac{a}{2} \omega_{\max} \cos \frac{qa}{2}, \quad \text{где}$   
 $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/M}.$



**Задача 8.5.** (Фононы в одномерной цепочке, состоящей из атомов двух сортов). В одномерной цепочке атомов (рис. 8.6) масса четных по порядку номеров атомов (черные кружки) больше, чем масса нечетных (белые кружки):  $M_1 > M_2$ . Определите закон дисперсии и групповую скорость фононов в приближении длинных и коротких волн.

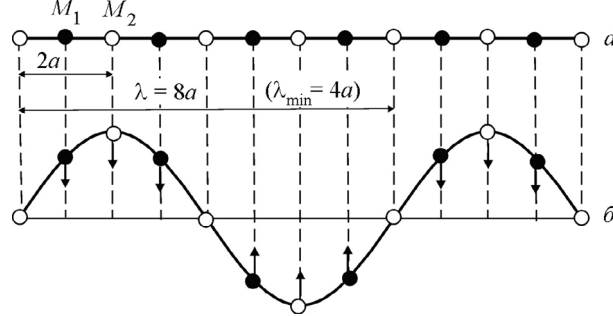


Рис. 8.6. *a* — одномерная цепочка из атомов двух сортов: масса атомов, отмеченных черными кружками больше массы атомов, отмечены светлыми кружками  $M_1 > M_2$ ; *б* — акустическая волна в цепочке с длиной волны  $\lambda = 8a$

**Решение.** Как и при решении задачи 8.4, запишем уравнения движения двух соседних атомов с разными массами:

$$M_1 \ddot{\xi}_{2n} = \beta (\xi_{2n+1} + \xi_{2n-1} - 2\xi_{2n}), \quad (8.25)$$

$$M_2 \ddot{\xi}_{2n+1} = \beta (\xi_{2n+2} + \xi_{2n} - 2\xi_{2n+1}). \quad (8.26)$$

Решение уравнений будем искать в виде (8.18), то есть в виде колебаний атомов в среде, в которой распространяется волна  $e^{i(\omega t + qx)}$ :

$$\xi_{2n} = \zeta e^{i(\omega t + 2nqa)}, \quad (8.27)$$

$$\xi_{2n+1} = \eta e^{i(\omega t + (2n+1)qa)}, \quad (8.28)$$

где координаты четных атомов равны  $x = 2na$ , нечетных —  $x = (2n+1)a$ , а  $\zeta$  и  $\eta$  — соответствующие амплитуды колебаний.

Подставляя (8.27) и (8.28) в уравнения движения (8.25) и (8.26), получаем систему уравнений:

$$-\omega^2 M_1 \zeta = \beta \eta (e^{iqa} + e^{-iqa}) - 2\beta \zeta, \quad (8.29)$$

$$-\omega^2 M_2 \eta = \beta \zeta \left( e^{iqa} + e^{-iqa} \right) - 2\beta \eta. \quad (8.30)$$

Система имеет нетривиальное решение, если детерминант коэффициентов этой системы равен нулю:

$$\begin{vmatrix} 2\beta - \omega^2 M_1 & -2\beta \cos qa \\ -2\beta \cos qa & 2\beta - \omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0.$$

Полученное уравнение имеет два решения — две различных собственных частоты колебаний неоднородной цепочки атомов:

$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}. \quad (8.31)$$

Как и в случае цепочки, состоящей из одинаковых атомов, дискретный набор волновых чисел находится из условий цикличности Борна–Кармана (8.19)  $\xi_{2n} = \xi_{2n+N}$  и  $\xi_{2n+1} = \xi_{2n+1+N}$ :

$$q_i = \frac{2\pi}{Na} i = \frac{2\pi}{L} i, \quad i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{4}. \quad (8.32)$$

В приближении  $qa \ll 1$ , что соответствует **длинноволновой области** спектра, частоты можно записать в виде:

$$\omega_+ \approx \sqrt{2\beta \left( \frac{1}{M_2} + \frac{1}{M_2} \right)}, \quad (8.33)$$

$$\omega_- \approx \left( a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}} \right) q. \quad (8.34)$$

Зависимость (8.34) аналогична (8.22) и описывает закон дисперсии длинноволновых продольных акустических фононов, групповая скорость которых

$$V_{\text{гр}}^{ak} = a \sqrt{\frac{2\beta}{M_1 + M_2}} \quad (8.35)$$

при  $M_1 = M_2$  переходит в выражение для скорости длинноволновых колебаний (8.23) в моноатомной цепочке.

В том же приближении  $qa \ll 1$ , подставляя (8.33) и (8.34) в одно из уравнений (8.29) или (8.30), находим отношение амплитуд колебаний при частотах  $\omega_-$  и  $\omega_+$ :

$$\omega_-: (\zeta/\eta)_- = 1; \quad (8.36)$$

$$\omega_+: (\zeta/\eta)_+ = -M_2/M_1. \quad (8.37)$$

В соответствие с (8.36) колебания соседних атомов для акустической ветви  $\omega_-$  происходят с одинаковой амплитудой и практически синфазно при больших  $\lambda$  (рис. 8.6 б).

Из (8.37) следует, что во второй ветви колебаний  $\omega_+$  соседние атомы колеблются в противофазе и с разными амплитудами. Записывая выражение (8.37) в виде

$$\frac{M_1\zeta + M_2\eta}{M_1 + M_2} = 0, \quad (8.38)$$

приходим к выводу, что колебания соседних атомов происходят так, что амплитуда смещения центра масс атомов в элементарной ячейке равна нулю. Эта **ветвь колебаний называется оптической** (см. ниже рис. 8.9).

Общий вид дисперсионных кривых  $\omega_-(q)$  и  $\omega_+(q)$  (8.31) для акустической и оптической ветвей фононного спектра представлен на рис. 8.7. Все энергетически различные состояния фононов находятся в интервале значений волнового вектора  $-\pi/2a \leq q \leq +\pi/2a$ , который представляет собой I зону Бриллюэна для двухатомной цепочки, период которой равен  $2a$ .

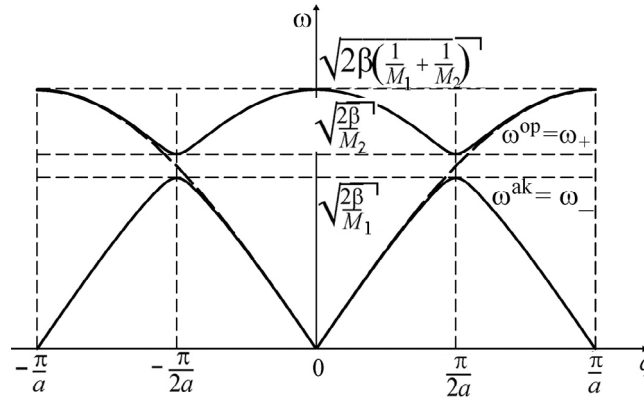


Рис. 8.7. Дисперсионные кривые для акустической  $\omega_-$  и оптической  $\omega_+$  ветвей фононного спектра

Максимальной частоте  $\omega_{\max} = \sqrt{2\beta/M_1}$  фононов акустической ветви соответствуют значения волнового вектора  $q = \pm \pi/(2a)$ . Частота оптических колебаний  $\omega_+(q)$  изменяется от  $\omega_{+\min} = \sqrt{2\beta/M_2}$  при  $q = \pm \pi/2a$  до  $\omega_{+\max} = \sqrt{2\beta(1/M_1 + 1/M_2)}$  при  $q = 0$ .

Характерно, что в длинноволновой области **частота оптических фононов практически не зависит от значений волнового вектора**. Кроме того, при значительном различии в массах соседних атомов  $M_1 \gg M_2$  оптические колебания происходят приблизительно с одной частотой во всей области значений  $q$ :

$$\omega_{\max} = \sqrt{2\beta \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} \approx \sqrt{\frac{2\beta}{M_2} \left( 1 + \frac{M_2}{2M_1} \right)}. \quad (8.39)$$

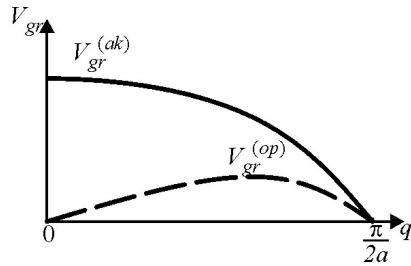


Рис. 8.8. Зависимость от волнового вектора групповой скорости акустических и оптических фононов для линейной цепочки атомов двух сортов.

Групповая скорость  $\partial\omega/\partial q$  оптических фононов как в максимуме, так и в минимуме дисперсионной кривой равна нулю:  $\partial\omega_+/\partial q = 0$  (рис. 8.8).

Между акустической и оптической ветвями спектра (рис. 8.8) расположена область запрещенных значений частот (и соответственно, энергий фононов) — **энергетическая щель** в законе дис-

персии фононов. Фононов с частотами, находящимися в области энергетической щели, не существует.

Проанализируем основные особенности колебаний атомов при распространении акустических и оптических волн. Найдем отношения амплитуд колебаний тяжелых и легких атомов для оптической и акустической ветвей в общем случае (аналогичные (8.36) и (8.37)), подставляя (8.31), например, в уравнение (8.30). Получаем

$$(\zeta/\eta)_- = \frac{1 - M_2/M_1 + \sqrt{(1 + M_2/M_1)^2 - 4(M_2/M_1)\sin^2 qa}}{2\cos qa} \quad (8.40)$$

для акустической ветви и

$$(\zeta/\eta)_+ = \frac{1 - M_2/M_1 - \sqrt{(1 + M_2/M_1)^2 - 4(M_2/M_1)\sin^2 qa}}{2\cos qa}. \quad (8.41)$$

для оптической ветви.

Как следует из (8.40), в области коротких волн  $\lambda \rightarrow 4a$  ( $q \rightarrow q^{\text{lim}} = \pi/(2a)$ ) для **акустической ветви**:

$$(\zeta/\eta)_- \Big|_{qa \rightarrow \pi/2} \rightarrow -\infty,$$

т. е. по мере приближения к границе зоны Бриллюэна ( $q \rightarrow \pi/(2a)$ ) происходит уменьшение амплитуды колебаний легких атомов. Фононы акустической ветви с  $q = \pm \pi/(2a)$  имеют частоту  $\sqrt{2\beta/M_1}$  (рис. 8.8), которая соответствует колебаниям тяжелых атомов  $M_1$  при неподвижных легких.

В **оптической ветви** (см. (8.41)):

$$(\zeta/\eta)_+ \Big|_{qa \rightarrow \pi/2} \rightarrow \frac{M_2/M_1 \sin 2qa}{-\sin qa \sqrt{(1 + M_2/M_1)^2 - 4(M_2/M_1)\sin^2 qa}} \rightarrow -0,$$

то есть амплитуда колебаний тяжелых атомов уменьшается при приближении к границам зоны Бриллюэна. Фононы оптической ветви с волновым вектором  $q = \pi/(2a)$  имеют частоту  $\sqrt{2\beta/M_2}$ , соответствующую колебаниям легких атомов  $M_2$  при неподвижных тяжелых. При этом соседние легкие атомы колеблются в противофазе (рис. 8.9 а).

При увеличении длины волны  $\lambda$  в оптической ветви начинают колебаться тяжелые атомы, а разность фаз колебаний соседних идентичных атомов уменьшается (рис. 8.9 б, в). В пределе  $q \rightarrow 0$ , когда разность фаз обращается в нуль, атомы одного сорта можно считать неподвижными друг относительно друга. В этом случае ( $\lambda \rightarrow \infty$ ,  $q \rightarrow 0$ ) оптические колебания представляют собой колебания в противофазе двух жестких подрешеток (легких и тяжелых атомов) друг относительно друга, при этом центр масс остается неподвижным ((8.38), рис. 8.9 г).

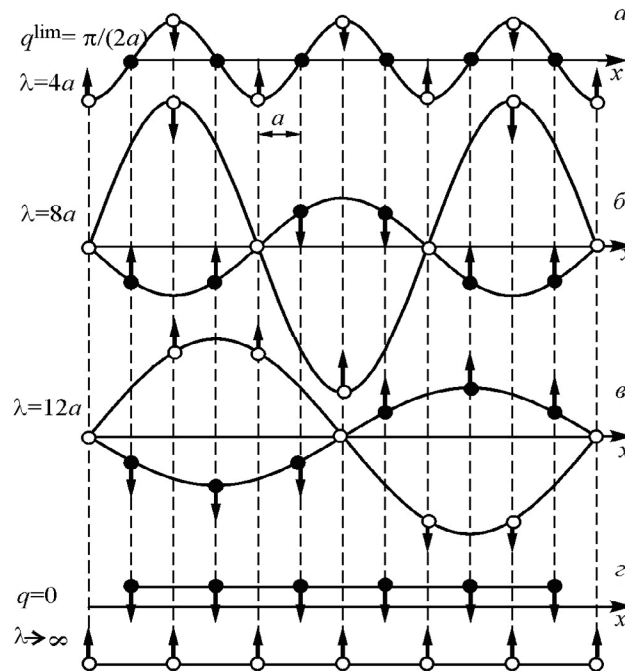


Рис. 8.9. Смещение атомов в линейной цепочке при возбуждениях, соответствующих оптическим фононам с длинами волн: а–в —  $\lambda = 4a$ ,  $8a$  и  $12a$  соответственно; г —  $\lambda \rightarrow \infty$ , колебания атомов одного сорта происходят синфазно, но в противофазе с атомами второго сорта.

Оптические колебания с волновыми векторами  $q^{\text{lim}} = \pi/(2a)$  и  $q = 0$  соответствуют стоячим волнам, имеющим разные энергии. Предположим, что все атомы в цепочке становятся одинаковыми. Тогда оптическим колебаниям с  $q = 0$  будут соответствовать акустические колебания с  $\lambda = 2a$ , то есть с волновым вектором  $q = \pi/a$ , в два раза превышающим значение  $q^{\text{lim}} = \pi/(2a)$ . Учитывая закон дисперсии, можно сделать вывод, что частота оптических колебаний при  $q = 0$  больше частоты колебаний при  $q = q^{\text{lim}}$ .

Заметим, что для появления оптических колебаний не обязательно, чтобы решетка состояла из атомов разной массы. Существенно лишь, чтобы положение всех атомов в решетке не было одинаковым и можно было бы выделить две или более подрешеток. Например, в структурах с двумя атомами, приходящимися на элементарную ячейку, можно выделить две подрешетки с различными

упругими постоянными, независимо от того, одинаковые по массе эти атомы или нет.

$$\text{Ответ. } \omega_{\pm}^2 = \beta \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \beta \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}.$$

**Задача 8.6. (Температура Дебая.)** Оценить температуру Дебая для железа, полагая скорости распространения продольных и поперечных волн одинаковыми и равными  $v_s = 5 \text{ км/с}$ . Плотность железа  $\rho = 7,8 \text{ г/см}^3$ .

**Решение.** По определению, температура Дебая (8.2) связана с максимальной частотой фононов:  $k_B T_D = \hbar \omega_{\max}$ .

Максимальное значение волнового вектора  $q_{\max} = [6\pi^2 N / L^3]^{1/3}$  (8.10) связано с концентрацией атомов  $n = N / L^3$ , которая, в свою очередь, определяется плотностью  $\rho$  вещества:  $n = \frac{\rho}{m} = \frac{\rho N_A}{M}$ , где  $m$  — масса одного атома железа,  $M$  — молярная масса железа. Таким образом,

$$q_{\max} = [6\pi^2 N / L^3]^{1/3} = [6\pi^2 n]^{1/3} = \left[ 6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3}.$$

Используя линейный закон дисперсии  $\omega = vq$ , получаем выражение для оценки температуры Дебая

$$T_D = \frac{\hbar}{k_B} v_s q_{\max} = \frac{\hbar}{k_B} v_s [6\pi^2 n]^{1/3} = \frac{\hbar}{k_B} v_s \left[ 6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3}.$$

Подставляя числовые данные  $v_s = 5 \text{ км/с} = 5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$ ,  $\rho = 7,8 \text{ г/см}^3 = 7,8 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ ,  $M = 55,8 \text{ г/моль}$ , находим

$$\begin{aligned} T_D &= \frac{\hbar}{k_B} v_s \left[ 6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3} = \\ &= \frac{10^{-34}}{1,38 \cdot 10^{-23}} 5 \cdot 10^3 \left[ 6\pi^2 \frac{7,8 \cdot 10^3 \cdot 6 \cdot 10^{23}}{55,8 \cdot 10^{-3}} \right]^{1/3} \approx 615 \text{ К}. \end{aligned}$$

$$\text{Ответ. } T_D = \frac{\hbar}{k_B} v_s \left[ 6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{1/3} \approx 615 \text{ К}.$$

### §8.6. Решеточная теплоемкость

**Задача 8.7.** Определить качественную зависимость молярной изохорической теплоемкости от температуры для монокристаллической трехмерной кубической решетки. Рассмотреть предельные случаи низких и высоких температур. Период решетки  $a$ . Закон дисперсии линейный:  $\omega = v_{gr}q$ .

**Решение.** Чтобы найти решеточную теплоемкость, т. е. теплоемкость, связанную с колебаниями атомов кристалла, нужно знать температурную зависимость средней тепловой энергии колебаний атомов. Теплоемкость тела определяется соотношением  $C_0 = \delta Q/dT$ , а теплоемкость при постоянном объеме

$$C_{0V} = \frac{d\langle E(T) \rangle}{dT}, \quad (8.42)$$

где  $\delta Q$  — элементарное количество теплоты,  $\langle E(T) \rangle$  — средняя тепловая энергия решетки.

В фоновой модели  $\langle E(T) \rangle$  является суммой средних тепловых энергий фононов в каждой моде колебаний. Мода колебаний характеризуется частотой, волновым вектором (или импульсом) и поляризацией. В каждом квантовом состоянии с определенной энергией и импульсом в трехмерном случае находятся фононы трех мод колебаний, соответствующие трем поляризациям волн: двум поперечным и одной продольной.

**Приближение низких температур**  $T \ll T_D$ .

Учитывая, что число фононов с энергиями  $\hbar\omega > k_B T$  экспоненциально мало (8.15), то можно считать, что при температуре  $T$  возбуждаются только фононы, энергия которых  $\hbar\omega \leq k_B T$ . Состояния этих фононов в пространстве волновых векторов находятся внутри сферической поверхности постоянной частоты  $\omega_T \sim k_B T / \hbar$ . Энергия каждой возбужденной моды, чьи квантовые состояния находятся внутри объема, ограниченного данной поверхностью, пропорциональна  $\sim k_B T$  (8.16). Учитывая, что различных поляризаций три, получаем, что энергия фононов, находящихся в каждом квантовом состоянии равна  $3k_B T$ . Число возбужденных квантовых состояний равно числу квантовых состояний в объеме, ограниченном



сферой. Для линейного закона дисперсии  $\omega = v_{\text{гр}} q$  радиус сферы  $q_T$  определим из соотношения  $k_B T = \hbar \omega_T = \hbar v_{\text{гр}} q_T$ :

$$q_T = \frac{k_B T}{\hbar v_{\text{гр}}}. \quad (8.43)$$

Число состояний  $N_T^{ak}$  в объеме, ограниченной сферой:

$$N_T = \frac{4/3(\pi q_T^3)}{(2\pi/L)^3} = \frac{(k_B T)^3 L^3}{6 \cdot \pi^2 (\hbar v_{\text{гр}})^3}.$$

Энергия всех возбужденных фононов (тепловая энергия решетки):

$$E(T) = 3N_T \cdot k_B T = \frac{(k_B T)^4 L^3}{3 \cdot \pi^2 (\hbar v_{\text{гр}})^3}.$$

Теплоемкость решетки объемом  $L^3$ :

$$C_0 = \frac{dE(T)}{dT} = \frac{4k_B^4 L^3}{3\pi^2 (\hbar v_{\text{гр}})^3} T^3.$$

Число атомов в узлах кубической решетки:  $L^3/a^3$ , число молей в объеме  $L^3$ :  $\nu_0 = \frac{L^3}{a^3 N_A}$ . Тогда для молярной теплоемкости имеем

$$C = \frac{C_0}{\nu_0} = \left( \frac{4}{3\pi^2} \right) \cdot \frac{k_B^4 a^3 N_A}{(\hbar v_{\text{гр}})^3} T^3. \quad (8.44)$$

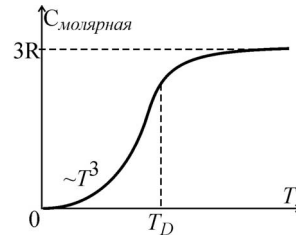


Рис. 8.10. Температурная зависимость молярной теплоемкости трехмерной кристаллической решетки.

Полученная зависимость  $C \sim T^3$  (9.44) носит название **закона Дебая**. Закон хорошо выполняется практически для всех кристаллических веществ при  $T \leq T_D/10$  (рис. 8.10).

Точные расчеты дают для теплоемкости формулу, отличающуюся от (8.44) только коэффициентом:

$$C = \left( \frac{2\pi^2}{5} \right) \cdot \frac{k_B^4 a^3 N_A}{(\hbar v_{gr})^3} T^3. \quad (8.45)$$

С учетом полученного в задаче 8.6 выражения для температуры Дебая, формула для молярной теплоемкости (8.45) приобретает простой вид:

$$C = \frac{12}{5} \pi^4 R \left( \frac{T}{T_D} \right)^3, \quad (8.46)$$

где  $R$  — универсальная газовая постоянная.

**Приближение высоких температур  $T \gg T_D$ .**

При высоких температурах  $T > T_D$  возбуждаются все моды акустических колебаний, число которых равно утроенному (за счет трех разных поляризаций) числу атомов в решетке  $N_T = 3(L/a)^3$ .

Энергия всех возбужденных фононов (тепловая энергия решетки):

$$E(T) = N_T k_B T = 3 \frac{L^3 k_B T}{a^3};$$

теплоемкость решетки объемом  $L^3$

$$C_0 = \frac{dE(T)}{dT} = \frac{3k_B L^3}{a^3}.$$

Учитывая, что число молей в объеме  $L^3$  равно  $\nu_0 = \frac{L^3}{a^3 N_A}$ , для

молярной теплоемкости при высоких температурах получаем **закон Дюлонга и Пти:**

$$C = 3k_B N_A = 3R.$$

Температурная зависимость молярной теплоемкости трехмерной кристаллической решетки представлена на рис. 9.10.

**Ответ.** При  $T \ll T_D$   $C = \left( \frac{4k_B^4 a^3 N_A}{3\pi^2 (\hbar v_{gr})^3} \right) T^3$ , при  $T \gg T_D$   $C = 3R$ .

**Задача 8.8. (Модель Эйнштейна).** В модели Эйнштейна кристалл рассматривается как совокупность независимых идентичных

квантовых осцилляторов с одинаковой частотой  $\omega_0$ . Вообще говоря, применение модели Эйнштейна к кристаллам не вполне корректно, так как спектр колебаний сужается до одной частоты. Однако модель может быть использована для описания оптических колебаний, так как частотный интервал оптических фононов достаточно узкий и позволяет аппроксимировать его одной частотой.

Оцените в рамках модели Эйнштейна колебательную энергию и теплоемкость решетки.

**Решение.** Средняя тепловая энергия одного моля вещества в модели Эйнштейна (с учетом трех возможных поляризаций):

$$\langle E \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \langle n_{\omega_0} \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \cdot \left[ \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (8.47)$$

где  $\hbar \omega_0$  — энергия одного фонона,  $\langle n_{\omega_0} \rangle$  — среднее число фононов при температуре  $T$ .

Молярная теплоемкость решетки:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3R \left( \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) \left[ \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-2}. \quad (8.48)$$

**При низких температурах** ( $k_B T \ll \hbar \omega_0$ ) энергия (8.47) и теплоемкость (8.48) характеризуются экспоненциальной зависимостью от  $\hbar \omega_0 / (k_B T)$ :

$$\langle E \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right), \quad (8.49)$$

$$C = 3R \left( \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right). \quad (8.50)$$

**При высоких температурах**  $k_B T \gg \hbar \omega_0$ , когда возбуждены все три ветви оптических фононов, получаем

$$\langle E \rangle = 3RT, \quad (8.51)$$

$$C = 3R. \quad (8.52)$$

В рамках модели Эйнштейна теплоемкость при низких температурах экспоненциально зависит от  $T$ , а в модели Дебая (8.44)  $C \sim T^3$ . В пределе высоких температур модели Эйнштейна и Дебая дают одинаковые значения теплоемкости:  $C = 3R$ .

**Ответ.**  $\langle E \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \left[ \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1},$

$$C = 3R \left( \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) \left[ \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-2}.$$

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача 8.1.** Получить температурную зависимость для тепловой энергии и молярной теплоемкости **двумерных слоистых квадратных решеток**. Скорость звука  $V_s$ . Покажите, что теплоемкость линейных цепочек пропорциональна температуре.

**Ответ.**  $E(T) = 2k_B T \frac{\pi q^2}{(2\pi/L)^2} = \frac{(k_B T)^3}{2\pi \hbar^2 V_s^2}, \quad C = \frac{k_B^3 a^2 N_A}{2\pi \hbar^2 V_s^2} T^2.$

**Задача D8.2.** Определить дебаевскую температуру для **двумерных слоистых квадратных решеток**. Скорость продольных и поперечных волн считать одинаковой и равной  $V_s$ . Число атомов, приходящихся на единицу площади равно  $n$ .

**Ответ.**  $T_D = \frac{\hbar}{k_B} V_s \sqrt{4\pi n}.$

**Задача D8.3.** Найти скорость звука в линейной цепочке идентичных атомов с дебаевской температурой 300 К и межатомным расстоянием 0,25 нм.

**Ответ:**  $V_s = \frac{k_B T_D a}{\pi \hbar} \approx 3,1 \text{ км/с}.$

**Задача D8.4.** Оцените скорость распространения продольных акустических колебаний в алюминии ( $T_D = 400 \text{ К}$ ).

**Ответ:**  $V_s = \frac{T_D k_B}{\hbar} \left[ 6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M} \right]^{-1/3} = 3,4 \text{ км/с}.$

**Задача D8.5.** Оцените максимальную частоту колебаний атомов меди, если при температуре  $T = 125 \text{ К}$  молярная теплоемкость

меди отличается от классического значения при высоких температурах на  $\alpha = 25\%$ .

**Ответ.**  $\omega_{\max} = \frac{k_B T}{\hbar} \left( \frac{4\pi^4}{5(1-\alpha/100)} \right)^{1/3} \approx 8,1 \cdot 10^{13} \text{ рад/с}.$

**Задача D8.6.** Оцените энергию, которую необходимо сообщить 27 г алюминия, чтобы нагреть его от  $T_D/20$  до  $T_D/10$  ( $T_D \approx 400 \text{ К}$ ).

**Ответ.**  $\Delta Q = \int_{T_D/20}^{T_D/10} C dT \approx 2 \cdot 10^{-5} \pi^4 R T_D \approx 6,4 \text{ Дж}.$

**Задача D8.7.** Найдите число продольных мод колебаний в диапазоне частот  $(\omega, \omega+d\omega)$  для цепочки из  $N$  атомов, расположенных с периодом  $a$ . Масса каждого атома  $m$ . Коэффициент жесткости связи между атомами равен  $\beta$ . Считайте, что на движение каждого атома влияют лишь его ближайшие соседи.

**Ответ:**  $dn = \frac{2Nd\omega}{\pi\sqrt{4\beta/m - \omega^2}}.$

**Задача D8.8.** Определите молярную теплоемкость кристаллической решетки при температуре  $T_D/20$ . На сколько процентов отличается молярная теплоемкость решетки при этой температуре от классического значения при высоких температурах?

**Ответ:**  $C = 3 \cdot 10^{-4} \pi^4 R \approx 0,03R; \quad C_0 - C = 3R - 0,03R = 3R \cdot 0,99, 99\%.$

## Глава 9

## ЭЛЕКТРОНЫ В МЕТАЛЛЕ

## §9.1. Плотность состояний и плотность заполнения энергетических уровней

1. *Состояния электронов при  $T = 0$  К* были рассмотрены в гл. 6 (см. задачу 6.3). Напомним, что каждое состояние в импульсном пространстве объемом  $(2\pi\hbar)^3/V$  ( $V$  — объем металлического кристалла) может вместить два электрона с противоположно направленными спинами (принцип Паули). При  $T = 0$  К все заполненные состояния (самые низкие энергетические состояния) расположены внутри сферы, называемой **поверхностью Ферми** (см. рис. 6.5), радиус которой  $p_F = \hbar k_F$  определяется числом  $zN$  свободных (валентных) электронов ( $N$  — число атомов,  $z$  — их валентность):

$$2 \frac{(4/3)\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3/V} = zN. \quad (9.1)$$

**Концентрация коллективизированных электронов** равна  $n = zN/V$ .

Из (9.1) находятся максимально возможные при  $T = 0$  К значения импульса  $p_F$  (**импульса Ферми**) (6.23):

$$p_F = \hbar \left( 3\pi^2 \cdot zN/V \right)^{1/3} = \hbar \left( 3\pi^2 n \right)^{1/3}, \quad (9.2)$$

**и энергии Ферми** (6.24), пропорциональной  $n^{2/3}$ :

$$E_F(0) = \frac{p_F^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 3\pi^2 n \right)^{2/3}. \quad (9.3)$$

Непрерывный энергетический спектр  $E = p^2/(2m)$ , характерный для свободного электрона, становится дискретным.

**Плотность состояний**  $\rho(E)$  или число состояний электронов в единичном интервале энергии, равна (6.26)

$$\rho(E) \equiv \frac{dn_s}{dE} = \frac{\sqrt{2}m_0^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E} \sim \sqrt{E}, \quad (9.4)$$

где  $dn_s$  — число состояний в интервале энергии  $dE$ . Плотность состояний для электронов — важная характеристика. Она оп-

ределяет максимальное число электронов, которое может разместиться в данном интервале энергий, что, в конечном итоге, определяет все свойства вещества.

Вид функции  $\rho(E)$  (9.4) показан на рис. 9.1 б. Плотность состояний  $\rho(E)$  растет с увеличением энергии пропорционально  $\sqrt{E}$ .

При  $T=0$  К состояния с  $E < E_F$  полностью заполнены, так как  $f(E < E_F) = 1$ , а состояния с  $E > E_F$  — пустые. Очевидно, что при  $T=0$  К площадь под кривой  $\rho(E)$  в пределах от 0 до  $E_F$  дает полную концентрацию электронов (рис. 9.1 б):

$$n = \frac{zN}{V} = \int_0^{E_F} \rho(E) dE. \quad (9.5)$$

2. При температуре, отличной от нуля, кроме квантованной кинетической энергии у электронов появляется тепловая энергия хаотического движения (порядка  $k_B T$ ). Поэтому электроны, находящиеся вблизи поверхности Ферми, могут перейти в свободные состояния вне поверхности Ферми. Возможность перехода аналитически описывается распределением Ферми–Дирака:

$$f(E) = \left[ 1 + \exp \left[ \frac{E - \mu}{k_B T} \right] \right]^{-1}.$$

Распределение Ферми–Дирака при отличных от нуля температурах размыто (рис. 9.1 а): имеется отличная от нуля вероятность обнаружения электронов с энергиями  $E_F < E < E_F + 2k_B T$  и свободных, незаполненных состояний с энергиями  $E_F - 2k_B T < E < E_F$ .

Рассмотрим, как заполняются электронами состояния, плотность которых описывается формулой (9.4), при  $T \neq 0$  К. Число

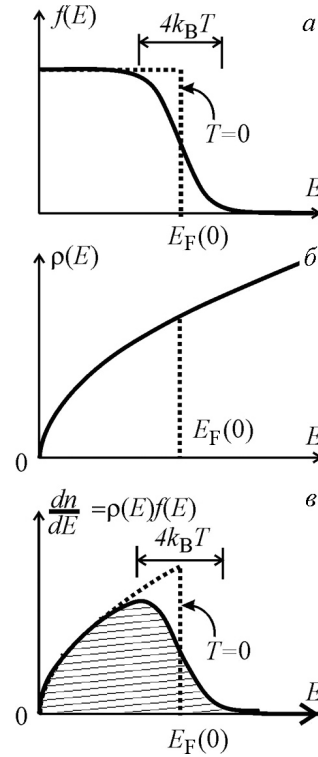


Рис. 9.1. Зависимости от энергии  $E$ : а — вероятности заполнения электронами состояний  $f(E)$ , б — плотности состояний  $\rho(E)$  и в — плотности заполнения уровня энергии  $dn/dE$ .

электронов  $dn$ , обладающих энергиями в бесконечно узком интервале значений от  $E$  до  $(E + dE)$ , будет равно **произведению плотности состояний** (числу состояний в этом интервале энергий) **на вероятность** их заполнения:

$$dN = \rho(E) f(E) dE .$$

При этом функция

$$\frac{dn}{dE} = \rho(E) f(E) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{E}}{1 + \exp\left(\frac{E - \mu}{k_B T}\right)} \quad (9.6)$$

описывает **плотность заполнения энергетических уровней** при температуре  $T$ . На рис. 9.1 в представлены зависимости плотности заполнения  $dn/dE$  при  $T = 0$  К (пунктирная кривая) и при  $T \neq 0$  К (сплошная кривая). Величина размытости четкой (при  $T = 0$  К) границы заполнения энергетических уровней при низких температурах (так же как и для  $f(E)$ ) составляет величину порядка  $4k_B T$  (см. (7.13)).

При  $T \neq 0$  К концентрация электронов равна заштрихованной площади на рис. 9.1 в, то есть рассчитывается по формуле:

$$n = \int_0^\infty \frac{dn}{dE} dE = \int_0^\infty f(E) \rho(E) dE . \quad (9.7)$$

*Замечание.* Функция  $f_L(E) = (1/n) dn(E)/dE$  называется **функцией распределения электронов по энергетическим уровням**.

Знание функции заполнения  $dn(E)/dE$  энергетических уровней (или функции распределения по энергии  $f_L(E)$ ) позволяет вычислять средние значения любых функций от энергии.

Пусть необходимо вычислить среднее значение некоторой функции от энергии  $\langle \varphi(E) \rangle$  при достаточно низких температурах, то есть для вырожденного электронного газа.

По определению, среднее значение функции  $\varphi(E)$  равно

$$\langle \varphi(E) \rangle = \int_0^\infty \varphi(E) f_L(E) dE = \frac{1}{n} \int_0^\infty \varphi(E) f(E) \rho(E) dE , \quad (9.8)$$



где  $\rho(E)$  определяется формулой (9.4),  $f(E)$  – функция распределения Ферми–Дирака (7.12).

### §9.2. Энергия Ферми и химический потенциал

**Химический потенциал**  $\mu$  в статистической физике равен энергии состояния, вероятность заполнения которого равна  $1/2$  (см. замечания к задаче 7.1).

Энергия Ферми  $E_F$  **для металлов** равна химическому потенциалу  $\mu$  при  $T = 0$  К.

**При низких температурах** ( $k_B T \ll E_F$ ), граница заполнения энергетических состояний размывается симметрично относительно значения  $f(\mu) = 1/2$  на величину порядка  $\pm 2k_B T$ . При этом  $\mu$  практически совпадает с  $E_F$  и вероятность заполнения электроном состояния на уровне Ферми (т.е. с энергией  $E_F$ ) равна:  $f(E_F) \approx 1/2$ .

При дальнейшем повышении температуры размытие становится несимметричным и значение химического потенциала смещается в область низких энергий. В этой области температур система характеризуется значением химического потенциала, а не энергией Ферми.

В области низких температур смещение химического потенциала вырожденного электронного газа с ростом температуры можно вычислить с помощью изложенного выше метода для расчета средних значений (9.8). Опуская вычисления, приведем конечную формулу зависимости химического потенциала от температуры:

$$\mu \cong E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]. \quad (9.9)$$

Так как при низких температурах  $k_B T \ll E_F$ , то смещение химического потенциала  $\mu$  с ростом температуры имеет второй порядок малости.

**При высоких температурах** для электронов с энергиями

$$E - \mu \gg k_B T, \quad (9.10)$$

находящимися на «хвосте» распределения Ферми–Дирака, распределение Ферми–Дирака (7.12) можно преобразовать. Так как по

условию (9.10) значение экспоненты в знаменателе  $f(E)$  (9.12) значительно больше единицы, то, пренебрегая единицей, функцию распределения для таких электронов можно представить в виде

$$f(E) = \exp\left[-\frac{E - \mu}{k_B T}\right] = C(T) \exp\left[-\frac{E}{k_B T}\right]. \quad (9.11)$$

Она совпадает с функцией распределения Гиббса для частиц, подчиняющихся классической **статистике Максвелла–Больцмана**, когда число доступных состояний значительно больше числа частиц, способных занять эти состояния.

Химический потенциал понижается с ростом температуры  $T$  (см. рис. 7.1 и (9.9)). Число электронов, описываемых статистикой Максвелла–Больцмана (9.11), растет. Чтобы условие (9.10) выполнялось для всех электронов, т. е., чтобы все электроны системы описывались статистикой Максвелла–Больцмана, энергия каждого электрона должна превышать  $\mu$ , то есть химический потенциал должен стать отрицательным  $\mu < 0$ .

*Электронный газ, подчиняющийся статистике Максвелла–Больцмана, называется невырожденным, а подчиняющийся статистике Ферми–Дирака — вырожденным. Температура (7.14)*

$$T^* = \frac{E_F}{k_B} \quad (9.12)$$

называется **температурой вырождения** электронов или температурой Ферми.

При  $T \gg T^*$  ступенчатый характер распределения меняется на экспоненциальный.

Электроны проводимости практически всех металлов находятся в состоянии сильного вырождения. При этом электроны вблизи уровня Ферми имеют энергию, значительно превосходящую кинетическую энергию их теплового движения.

**В термодинамике химический потенциал** определяет изменение энергии системы частиц при изменении числа частиц на единицу. Он равен производной по числу частиц в системе от внут-

ренней энергии  $\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N}\right)_{S,V}$  при постоянном объеме  $V$  и энтропии

$S$  (или любого другого термодинамического потенциала – свободной энергии  $F$ , энтальпии  $H$  или потенциала Гиббса  $G$ :

$$\mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \left( \frac{\partial H}{\partial N} \right)_{S,p} = \left( \frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,p}, \text{ где } p - \text{давление). Можно по-}$$

казать, что статистическое и термодинамическое определения химического потенциала совпадают.

Химический потенциал  $\mu$  определялся статистически (при выводе распределения Ферми–Дирака — по формуле (7.10)) аналогично статистическому определению температуры (7.6). Как и температура, химический потенциал  $\mu$  является **функцией состояния** и одинаков во всех частях термодинамической системы, находящейся в состоянии равновесия. Это относится и к случаю, когда термодинамическая система неоднородна. Например, при наложении внешнего статического поля или при контакте двух проводников происходит перераспределение электронов таким образом, чтобы химический потенциал стал одинаковым во всех частях системы. Выравнивание уровней химических потенциалов следует из термодинамического условия достижения максимума энтропии полной системы. Химический потенциал необходим для описания открытых систем, когда число частиц в системе может изменяться.

Термодинамическое определение химического потенциала  $\mu$  позволяет наглядно описать положение и смещение  $\mu$  при изменении температуры в металлах и полупроводниках.

**Величину химического потенциала** для электронной системы можно оценить, как изменение энергии системы при внесении одной частицы, одного электрона. При этом вносимый электрон приобретает возможность занимать *те же свободные энергетические состояния, что и электроны системы*.

**Для металлов** вносимый электрон при  $T = 0$  К, занимая свободное состояние с минимально возможным значением энергии, помещается на сферу Ферми с энергией  $E = E_F$ . Таким образом, химический потенциал совпадает с энергией Ферми  $\mu = E_F$ .

### §9.3. Элементарные возбуждения в системе коллективизированных электронов. Фермиевские электроны

1. Энергия кулоновского взаимодействия двух коллективизированных электронов в металле  $(1/4\pi\epsilon_0)(e^2/r)$  при среднем расстоянии между электронами  $r = n^{-1/3}$ , где  $n$  — концентрация элек-

тронов, по порядку величины близка к кинетической энергии  $\sim p_F^2/(2m_0)$  ( $m_0$  — масса свободного электрона). Поэтому, строго говоря, коллективизированные электроны в металле нельзя рассматривать как идеальный газ.

У идеального газа энергия складывается из энергий образующих его частиц, и при изменении числа частиц энергетические состояния (уровни энергии) других частиц не изменяются.

В жидкостной модели, в результате сильного взаимодействия между частицами, при добавлении или уменьшении числа частиц изменяется энергия не только всей системы, но и энергетические состояния всех частиц.

В основном состоянии (при  $T = 0$  К) электронный газ заполняет все состояния в сфере радиусом  $p_F$ , причем в каждом элементарном состоянии объемом  $(2\pi\hbar)^3$  (для кристалла единичного объема) находятся два электрона. Основное же состояние электронной жидкости, вообще говоря, бесструктурное.

В **теории Ландау** постулируется, что включение взаимодействия при переходе от ферми-газа к ферми-жидкости не меняет состояний электронов, т. е. состояния по-прежнему можно описывать посредством задания квазиимпульса. При этом *в основном состоянии (при  $T = 0$  К) ферми-жидкость занимает в  $p$ -пространстве тот же объем, что и ферми-газ.*

Состояние системы электронов при  $T \neq 0$  К (возбужденное состояние) в теории Ландау описывается введением **квазичастиц** — элементарных возбуждений. На низких уровнях возбуждения ансамбль квазичастиц можно считать почти идеальным газом и использовать хорошо развитую теорию идеального газа.

2. Одной из моделей, используемых для описания возбужденных состояний электронной ферми-жидкости, является модель **фермиевских электронов**

Пусть при возбуждении электронной системы один электрон переходит из заполненного состояния с  $|\mathbf{p}| \leq |\mathbf{p}_F|$  в свободное состояние с  $|\mathbf{p}| > |\mathbf{p}_F|$  и энергией  $E > E_F$  (рис. 9.2). Тогда над поверхностью Ферми появляется электрон, а освободившееся состояние заполняется одним из электронов с большей энергией. При этом, *во-первых*, поверхность, ограничивающая полностью заполненные состояния, сокращается, и энергия системы электронов с импульсами  $|\mathbf{p}| \leq |\mathbf{p}_F|$  уменьшается. *Во-вторых*, выделяющаяся при запол-

нении вакансии энергия расходуется на новое возбуждение ферми-жидкости и появление еще одного или нескольких возбужденных электронов. В результате таких переходов вблизи поверхности Ферми образуется *тонкий слой возбужденных электронов (фермиевских электронов)*. Поскольку фермиевских электронов (элементарных возбуждений) мало, то они образуют почти идеальный газ квазичастиц, обладающих энергией, близкой к энергии Ферми. При этом полагается, что все остальные электроны остаются в тех же состояниях, в каких они были при  $T = 0$  К.

Каждая квазичастица (элементарное возбуждение) характеризуется импульсом  $\mathbf{p}$ , зарядом  $-e$ , спином  $1/2$ , некоторой эффективной массой  $m^*$ , скоростью

$$v = \frac{p}{m^*} \sim v_F \quad (9.13)$$

и квадратичным законом дисперсии  $E = p^2/(2m^*)$ . За начало отсчета энергии принимается энергия состояния, соответствующего центру сферы Ферми ( $E = 0$ ) в импульсном пространстве ( $\mathbf{p} = 0$ ).

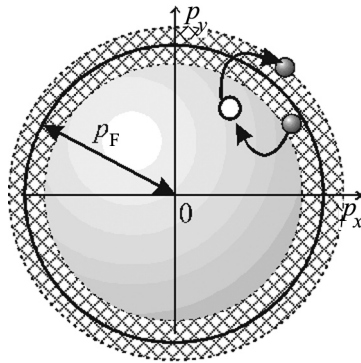


Рис. 9.2. Иллюстрация модели фермиевских электронов, используемой для описания возбужденного состояния электронной ферми-жидкости. Состояния фермиевских электронов занимают узкий (заштрихованный) слой вблизи поверхности Ферми.

Отличие эффективной массы  $m^*$  фермиевского электрона от массы свободного электрона  $m_0$  учитывает взаимодействие между частицами, в результате которого каждая частица движется в некотором самосогласованном поле других частиц. При этом энергия квазичастицы зависит от состояния других частиц, то есть является функцией от их функции распределения. Введение эффективной массы позволяет учесть это взаимодействие. Из теоретического

расчета и эксперимента следует, что для большинства металлов отличие  $m^*$  от  $m$  не превышает  $(10 \div 15)\%$ .

В дальнейшем фермиевские электроны будем называть просто электронами.

3. Оценим, насколько тонкий слой образуют фермиевские электроны при различных механизмах возбуждения.

При взаимодействии с фононами энергия электронов изменяется на величину  $\sim k_B T$ . При комнатной температуре  $k_B T \sim 0,03$  эВ. Во всей области температур  $T < 2\,000\text{K}$ , пока металл остается в твердом состоянии, отношение  $k_B T / E_F$  не превышает 0,02.

Приращение энергии электрона  $\Delta E$  в электрическом поле с напряженностью  $\mathcal{E}$  на длине свободного пробега  $\ell$  равно  $|e|\mathcal{E}\ell$  и, даже в сильных электрических полях, не превышает значений:

$$\Delta E \leq (10^{-4} \div 10^{-6}) \text{ эВ, т. е. } \Delta E / E_F \leq 2 \cdot 10^{-5}.$$

В сильных магнитных полях изменение энергии, связанное с квантовыми эффектами, равно  $\hbar\omega$  (см. ниже §11.2), где циклотронная частота  $\omega$  определяется индукцией магнитного поля  $\mathbf{B}$ :  $\omega = eB/m$  (11.22). В магнитных полях ( $\approx 10^2$  Тл) относительное изменение энергии  $\hbar\omega / E_F \leq 10^{-3}$ .

Заметим, что в классическом приближении при движении электрона в постоянном магнитном поле его энергия не меняется.

Полученные оценки показывают, что при тепловом воздействии или во внешних полях (электрическом, магнитном) возбужденные электроны действительно образуют очень тонкий слой вблизи поверхности Ферми. Поэтому модель фермиевских электронов является хорошим приближением для описания возбужденных состояний. Она используется при вычислении электронной теплоемкости, электронной теплопроводности и электропроводности металлов.

Описание энергетического спектра электронов в металлах при помощи квазичастиц существенно упрощает задачу. Вместо того, чтобы определять закон дисперсии  $E = E(\mathbf{p})$  в общем виде во всем пространстве импульсов, достаточно определить связь между энергией и импульсом вблизи постоянного значения энергии, равного энергии Ферми  $E_F$ .

### §9.4. Эффективная потенциальная энергия и волновая функция электронов в кристаллической решетке. Волна Блоха

Фермиевские электроны в металле находятся в кулоновском потенциальном поле ионов, образующих кристаллическую решетку. В то же время наличие отрицательно заряженной электронной жидкости в металле (образованной коллективизированными валентными электронами) приводит к ослаблению электрического поля (в результате экранировки), создаваемого положительно заряженными ионами. Благодаря этому область, в которой потенциальная энергия электрона вблизи выделенного иона имеет глубокий минимум, значительно сужается:  $\varphi \rightarrow \varphi_{scr}$  (рис. 9.3 а). В остальной части пространства внутри решетки потенциальная энергия электрона остается практически постоянной.

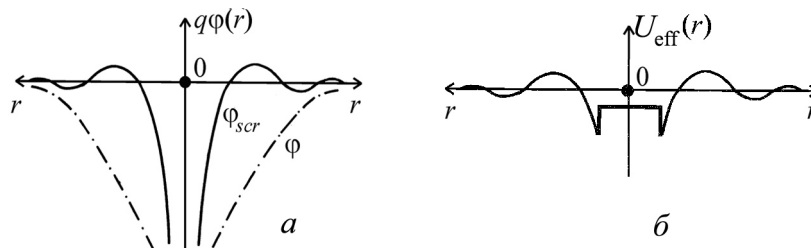


Рис. 9.3. Потенциальная энергия электрона: а – в кулоновском поле с потенциалами изолированного иона  $\varphi$  и иона, экранированного коллективизированными электронами  $\varphi_{scr}$ ; б – в эффективном поле.

В области постоянного потенциала движение фермиевского электрона можно рассматривать как движение свободной частицы, волновая функция которой представляет собой плоскую волну.

Попадая в потенциальную яму, электрон захватывается ионом и описывается быстро осциллирующими волновыми функциями связанных электронных состояний, характерных для валентных электронов изолированных атомов (рис. 9.4 а). Область действия ионных потенциалов на рис. 9.4 условно показана в виде заштрихованных кружков.

Вид волновой функции электрона в кристалле (рис. 9.4 а) достаточно сложен, и такую волновую функцию практически невозможно использовать для точных расчетов.

Используем следующую простейшую модель, когда вблизи иона **эффективный потенциал**  $\varphi_{\text{eff}}$  можно считать постоянным. Вид потенциальной энергии электрона  $U_{\text{eff}} = e \cdot \varphi_{\text{eff}}$  в поле эффективного потенциала  $\varphi_{\text{eff}}$  изображен на рис. 9.3 б. По величине эффективного потенциала мал, так что связанные состояния у фермиевских электронов не возникают и электрон в объеме всей решетки можно рассматривать как свободную частицу, движущуюся в слабом эффективном потенциальном поле. В этом случае движение электрона в кристалле можно описывать волновыми функциями в виде **плоских волн**, распространяющихся **в поле малого периодического потенциала** (рис. 9.4 б).

В теории параметры **эффективного потенциала решетки**  $\varphi_{\text{eff}} = U_{\text{eff}}/e$  подбираются таким образом, чтобы энергетический спектр электронов, описываемых плоскими волнами (рис. 9.4 б), совпадал с энергетическим спектром электронов, описываемых сложными волновыми функциями (типа рис. 9.4 а) в истинном потенциале решетки  $\varphi(r) = U(r)/e$ .

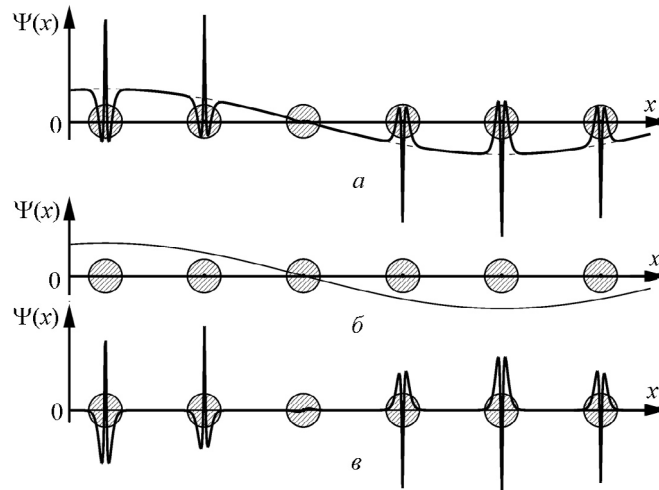


Рис. 9.4. Схематическое изображение волновых функций в кристалле. а – радиальная часть волновой функции электрона в кристалле в поле истинного потенциала, которую можно представить как комбинацию плоской волны б и осциллирующих волновых функций связанных состояний в; б – плоская волна свободного электрона в слабом эффективном поле решетки (приближение свободных электронов); в – быстро осциллирующая вблизи ионных сердцевин волновая функция связанных электронных состояний (радиальная часть функций типа  $\Psi_{3s}$ ) (приближение сильно связанных электронов).



Из периодичности эффективного потенциала вытекают два основных следствия: (1) периодичность амплитуды волновой функции и (2) неоднозначность волнового вектора.

1) *Периодичность амплитуды волновой функции.* Пусть  $a_1\mathbf{e}_x$ ,  $a_2\mathbf{e}_y$ ,  $a_3\mathbf{e}_z$  – основные трансляционные периоды решетки вдоль осей  $OX$ ,  $OY$  и  $OZ$  с единичными направляющими векторами  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$  и  $\mathbf{e}_z$  соответственно. Вектор

$$\mathbf{S} = j_1 a_1 \mathbf{e}_x + j_2 a_2 \mathbf{e}_y + j_3 a_3 \mathbf{e}_z, \quad (9.14)$$

где  $j_{1,2,3} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , называется **вектором трансляции**.

Потенциал в точках  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r} + \mathbf{S}$  одинаков. Точки  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r} + \mathbf{S}$  в периодической структуре физически эквивалентны (**трансляционная инвариантность**).

Периодичность потенциала идеальной решетки накладывает условие на электронные волновые функции  $\Psi_k(\mathbf{r})$ , которые, имея вид волновых функций свободных электронов  $\Psi(\mathbf{r}) = C \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})$  (рис. 9.4 б), теперь содержат модулирующий амплитудный множитель  $C_k(\mathbf{r})$ :

$$\Psi_k(\mathbf{r}) = C_k(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (9.15)$$

Так как плотность вероятности нахождения электрона в точках, отличающихся на вектор трансляции  $\mathbf{S}$ , должна быть одинаковой, то и **амплитуда электронной волны (9.15) также должна быть периодической функцией с периодом решетки:**

$$C_k \equiv C_k(\mathbf{r}) = C_k(\mathbf{r} + \mathbf{S}). \quad (9.16)$$

2) *Неоднозначность определения импульса в периодической структуре.* Рассмотрим одно из направлений, например  $\mathbf{e}_x$ , основных трансляций в решетке с периодом  $a$ . При переходе из точки  $x$  в эквивалентную точку с координатой, например,  $x \pm aj$  ( $j$  – целое число) фаза ( $kx$ ) волновой функции электрона (9.15) изменяется на величину  $\pm kaj$ . Учитывая условие (9.16), волновую функцию в точке  $x \pm aj$  можно записать в виде:

$$\Psi_k(x \pm aj) = C_k(x \pm aj) e^{-ik(x \pm aj)} = \Psi_k(x) e^{\mp ikaj}.$$

Видно, что при трансляции на период  $\pm aj$  волновая функция электрона умножается на фазовый множитель  $\exp(\pm ikaj)$ .

Волновая функция (9.15) стационарного состояния электрона в периодическом поле кристалла, которая при трансляции на вектор решетки  $\mathbf{S}$  (9.14) приобретает фазовый множитель  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{S}}$  и удовлетворяет условию периодичности (9.16), называется **волной или функцией Блоха**.

3. Обратим внимание на то, что при трансляции фазовый сдвиг для волн с волновыми векторами  $k$  и  $k' = k \pm j 2\pi/a$  ( $j$  – целое число) один и тот же, поскольку  $\exp(i2\pi j) = 1$ . Это означает, что электроны с волновыми векторами  $k$  и  $k'$  (или импульсами  $p$  и  $p' = p \pm j 2\pi\hbar/a$ ) движутся в кристалле одинаково, то есть решетка как бы “не различает” электроны, волновые векторы у которых различаются на величину  $\pm(2\pi/a)j$ . Следовательно, *состояния* (с учетом четной зависимости энергии от импульса  $E(-p) = E(p)$ ), *соответствующие векторам*

$$\mathbf{k} \text{ и } \mathbf{k}' = \pm\mathbf{k} \pm \frac{2\pi}{a} j \mathbf{e}_x, \quad (9.17)$$

$$\mathbf{p} \text{ и } \mathbf{p}' = \pm\mathbf{p} \pm \frac{2\pi\hbar}{a} j \mathbf{e}_x, \quad (9.18)$$

*физически неразличимы*, эквивалентны, то есть *соответствуют* одному и тому же физическому состоянию электрона в кристалле, а следовательно, *одной и той же энергии*.

На рис. 9.5 изображены две волновые функции, соответствующие двум значениям  $\mathbf{k}$ :  $k_1 = \pi/(4a)$  – функция 1 и  $k_2 = 7\pi/(4a)$  – функция 2, для свободного электрона в линейной цепочке атомов, расположенных вдоль оси  $x$ . Вертикальные черточки у каждого атома соответствуют вещественной части волновой функции.

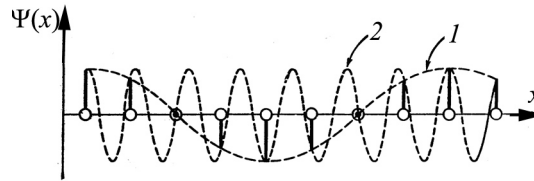


Рис. 9.5. Волновые функции фермиевского электрона с волновыми векторами  $k_1 = \pi/(4a)$  (функция 1) и  $k_2 = 7\pi/(4a)$  (функция 2) в линейной цепочке атомов (точки на оси  $Ox$ ) имеют одинаковое значение, обозначенное вертикальными черточками вблизи каждого атома.

Видно, что «с точки зрения атомов решетки» электронные волновые функции с  $k_1 = \pi/(4a)$  и  $k_2 = -k_1 + 2\pi/a = 7\pi/(4a)$  эквивалентны, то есть имеют одно и то же значение в узлах решетки. Таким образом, любой волновой функции в одномерной цепочке атомов можно сопоставить **приведенный волновой вектор** – вектор с наименьшим абсолютным значением  $k$  :

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}. \quad (9.19)$$

Область значений волнового вектора (9.19) является **приведенной (или первой) зоной Бриллюэна** (см. также (8.5)). **Вторая зона Бриллюэна** – область значений волновых векторов  $\pi/a \leq k \leq 2\pi/a$ ,  $-2\pi/a \leq k \leq -\pi/a$ , равная по объему первой зоне и прилегающая к ней (рис. 9.6). Все последующие зоны Бриллюэна, границы которых соответствуют значениям волнового числа

$$k = \pm \frac{\pi}{a} j, \quad (j \text{ — целое число}), \quad (9.20)$$

определяются аналогично.

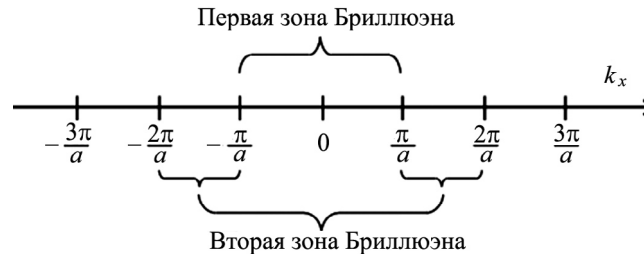


Рис. 9.6. Первая и вторая зоны Бриллюэна для одномерной цепочки атомов.

4. Поскольку все зоны Бриллюэна содержат физически эквивалентные наборы волновых векторов, то волновым векторам, отличающимся на  $(2\pi/a)j$ , должны соответствовать одни и те же значения энергии

Если эффективный потенциал равен нулю, электрон движется в решетке как свободная частица с энергией  $E = (\hbar k)^2 / (2m_0)$  (штриховая кривая на рис. 9.7, где  $k$  может меняться от нуля до сколь угодно большой величины. При наличии даже сколь угодно малого периодического потенциала ситуация качественно изменяется: пространство значений волнового вектора разделяется на об-

ласти физически эквивалентных значений (зон Бриллюэна) и одновременно возникает периодичность в зависимости энергии от импульса (рис. 9.7). **Закон дисперсии в приведенной зоне**, то есть зависимость энергии электрона от его импульса, получается сдвигом всех частей параболической зависимости  $E = (\hbar k)^2 / (2m_0)$  для свободного электрона на векторы  $\mathbf{G} = j(2\pi/a)\mathbf{e}_x$  ( $j = \pm 1, \pm 2, \dots$ ) в область (9.19) приведенных значений  $\mathbf{k}$ .

Результат таких трансляций показан на рис. 9.7 сплошными линиями. Ветви закона дисперсии в приведенной зоне (кривые  $A'B'$  и  $AC$ ) получаются путем сдвига частей параболического закона дисперсии  $AB$  (на вектор  $\mathbf{G} = -(2\pi/a)\mathbf{e}_x$ ) и  $C'A'$  (на вектор  $\mathbf{G} = +(2\pi/a)\mathbf{e}_x$ ). В результате получаем, что различным энергетическим состояниям электрона соответствует одно и то же значение приведенного вектора.

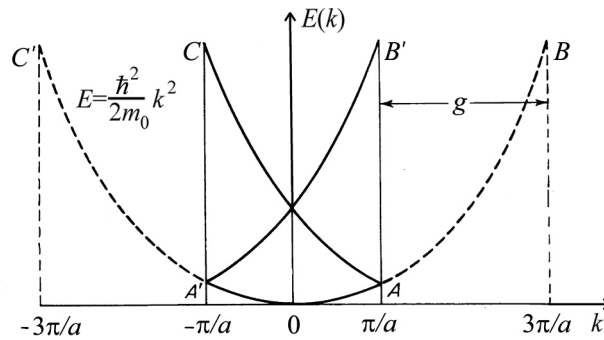


Рис. 9.7. Изменение квадратичного закона дисперсии электрона (штриховая кривая) под влиянием периодического потенциала решетки: эквивалентный сдвиг на векторы обратной решетки всех участков закона дисперсии в область приведенных значений волнового вектора. Результирующий закон дисперсии электрона изображен сплошными линиями.

Следовательно, не только разным  $\mathbf{k}'$  соответствует один и тот же приведенный волновой вектор  $\mathbf{k}$ , но, как видно на рис. 9.7, может существовать много электронных состояний с одним и тем же значением приведенного волнового вектора  $\mathbf{k}$ , но соответствующих различным энергиям.

Таким образом, **трансляционная инвариантность решетки приводит к многозначности импульса и энергии электрона в решетке.**

### §9.5. Энергетические зоны

Особенности движения электрона в металле непосредственно связаны с распространением в периодической структуре кристалла электронных волн – волн Блоха. Выше (задача 1.16) были рассмотрены условия отражения периодическими структурами электромагнитных волн. Электронные волны можно рассматривать аналогично электромагнитным, так как атомы, расположенные в узлах кристаллической структуры металла, являются рассеивающими центрами для коллективизированных электронов, то есть электронных волн. Будем рассматривать только **упругое рассеяние**, при котором длина электронной волны не изменяется.

Для большинства валентных электронов, свободно перемещающихся по кристаллу, рассеяние на атомах решетки слабое. Условия рассеяния электронных волн рассматриваются аналогично условиям отражения электромагнитных волн. При этом кристалл представляется в виде семейств эквидистантных плоскостей, образованных атомами решетки и проведенных таким образом, что каждый атом решетки обязательно находится на какой-либо из плоскостей данного семейства. Тогда, благодаря интерференции рассеянных атомными плоскостями волн, эффективно отражаются только электронные волны, длины волн которых удовлетворяют *условию (или закону) Брэгга–Вульфа дифракции рентгеновских лучей в кристаллах*:  $2d = j\lambda$  или  $k = \pi j/d$  ( $j = 1, 2, 3, \dots$ ,  $d$  – расстояние между атомными плоскостями), когда разность фаз  $\delta$  между отраженными от соседних атомных плоскостей волнами составляет целое число  $2\pi$ . Сравнивая (9.20) и условие Брэгга–Вульфа, можно заключить, что электроны с волновыми векторами, соответствующими границам зон Бриллюэна, испытывают **брэгговское отражение**, так же как и фононы, с такими же волновыми векторами (см. §8.4).

При наложении падающей и отраженной волн, удовлетворяющих условию Брэгга–Вульфа, образуются стоячие волны. Стоячая волна не переносит энергии и соответствует электрону с групповой скоростью  $v_{\text{гр}} = \partial E / \partial p = 0$ , в отличие от бегущих волн, для которых  $v_{\text{гр}} = \partial E / \partial p = p / m \neq 0$ . Существует только два типа стоячих волн, одни из которых на отражающих плоскостях имеют пучности, другие – узлы.

Для рассмотренной ранее одномерной цепочки атомов, расположенных вдоль оси  $OX$  с межатомным расстоянием  $a$ , условие Брэгга–Вульфа принимает вид

$$k = \frac{\pi}{a} j, \quad (j = \pm 1, \pm 2, \dots).$$

Тогда, например, для электронов с импульсом  $p = \pi\hbar/a$  (волновым вектором  $k = \pi/a$ ) суперпозиция падающей  $\Psi \sim e^{i(\pi/a)x}$  и отраженной  $\Psi \sim e^{-i(\pi/a)x}$  волн приводит к образованию двух стационарных состояний, описываемых стоячими волнами:

$$\Psi^- \sim e^{i\frac{\pi}{a}x} + e^{-i\frac{\pi}{a}x} \sim \cos \frac{\pi}{a}x, \quad (9.21)$$

$$\Psi^+ \sim e^{i\frac{\pi}{a}x} - e^{-i\frac{\pi}{a}x} \sim \sin \frac{\pi}{a}x. \quad (9.22)$$

На рис. 9.8 под графиком потенциальной энергии электронов в линейной цепочке атомов схематически изображено распределение плотности заряда  $q|\Psi(x)|^2$  ( $q$  – заряд электрона,  $|\Psi(x)|^2$  – плотность вероятности обнаружения электрона в точке с координатой  $x$ ), для трех волновых функций: плоской бегущей волны  $\Psi(x)$  (9.15),  $\Psi^-(x)$  (9.21) и  $\Psi^+(x)$  (9.22). Для свободного электрона, волновая функция которого представляет собой плоскую бегущую волну  $\Psi(x) \sim e^{ikx}$ , распределение электронного заряда однородно, электрон равновероятно может находиться в любой точке кристалла.

Для функции  $\Psi^-(x)$  плотность вероятности вблизи точки  $x = 0$ , а также вблизи любого другого узла рассматриваемой линейной цепочки, больше, чем между узлами. Так как потенциальная энергия электронов вблизи ионов отрицательна, то состоянию с функцией  $\Psi^-(x)$  соответствует значение энергии меньше, чем при равномерной плотности распределения заряда, на величину, пропорциональную потенциальной энергии электрона в поле эффективно-го решеточного потенциала  $U_{\text{eff}}$ .

По той же причине энергия состояния, описываемого функцией  $\Psi^+$ , будет на величину, пропорциональную  $U_{\text{eff}}$ , больше, чем для состояния, описываемого плоской бегущей волной  $\Psi(x)$ , так как для  $\Psi^+$  плотность заряда сосредоточена в основном в межатомных областях.

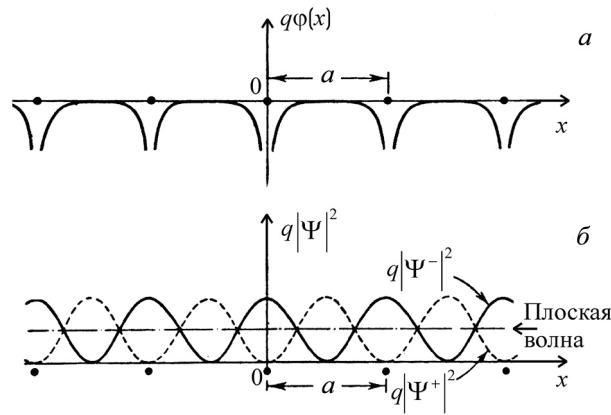


Рис. 9.8. *a* — потенциальная энергия электрона в одномерной цепочке атомов; *б* — распределение электронной плотности  $q|\Psi(x)|^2$  для электрона, описываемого плоской волной (9.15) (штрихпунктирная прямая) и стоячими волнами (9.21) и (9.22) (штриховая и сплошная кривые).

На рис. 9.9 *a* для одномерного случая показано изменение параболического закона дисперсии электронов на границе первой и второй зон Бриллюэна, связанное с брэгговским отражением и образованием двух энергетически различающихся состояний  $\Psi^+$  (точки В и В') и  $\Psi^-$  (точки А и А'). На рис. 9.9 (*б*, *в*) в схеме приведённых (*б*) и в схеме расширенных зон (*в*) изображён результирующий закон дисперсии с учетом как неоднозначности электронного импульса в периодической структуре, так и брэгговского отражения электронных волн. Энергетический спектр электронов разделяется на зоны разрешенных значений и области запрещенных значений энергии — **энергетические щели** (значения энергий между точками А и В на рис. 9.9 *a*). Величина энергетических щелей в спектре связана не с кинематикой, а с потенциальной энергией взаимодействия электронов с ионами. Она зависит от величины эффективного потенциала ионов решетки  $U_{\text{eff}}(r)$  для данного направления движения электрона.

Возникновение разрывов в энергетическом спектре означает, что не возможны никакие электронные состояния с значениями энергии, соответствующими энергетической щели.

Вдали от границ зон Бриллюэна достаточно слабый периодический потенциал  $U_{\text{eff}}(r)$  не может существенно изменить закон дисперсии. При малых импульсах электрон в решетке движется, в

первом приближении, как свободная частица с групповой скоростью  $v_{\text{гр}} = \partial E / \partial p = p/m$ . С ростом  $k$  (и импульса  $p$ ), приближаясь к границам зоны Бриллюэна, электрон как бы тормозится решеткой. При значениях  $k = \pm j(\pi/a)$  групповая скорость электронов  $v_{\text{гр}} = \partial E / \partial p$  с импульсами  $p = \pm j(\pi\hbar/a)$  равна нулю.

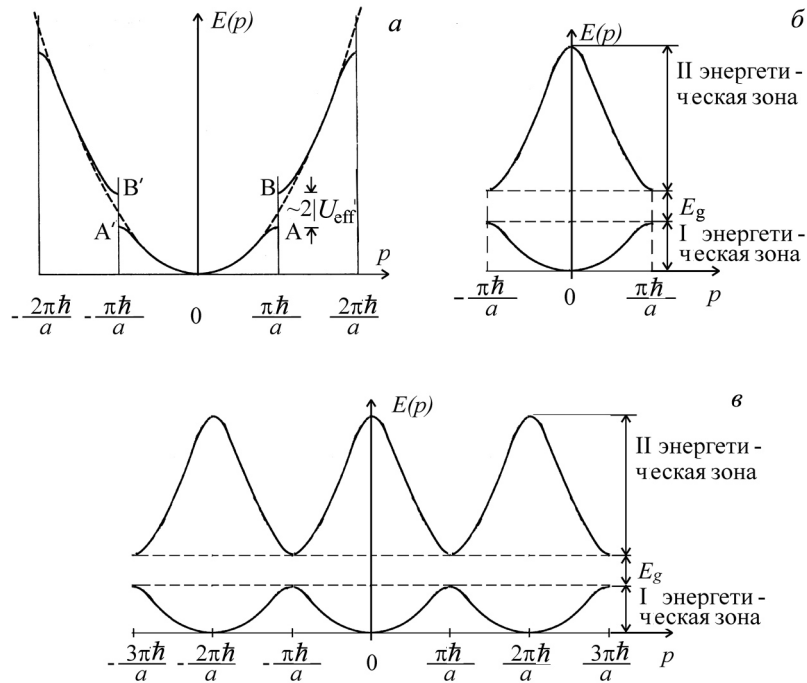


Рис. 9.9. Изменения закона дисперсии электрона при учете величины эффективного потенциала (а). Закон дисперсии в приведенной зоне Бриллюэна (б) и в схеме расширенных зон (в) при учете как величины, так периодичности эффективного потенциала.

Условие  $v_{\text{гр}} = \partial E / \partial p = 0$  на границе зоны Бриллюэна означает, что кривая  $E(p)$  должна подходить к границам зон  $p = \pm j(\pi\hbar/a)$  с нулевым наклоном касательной (рис. 9.9).

Так как групповая скорость  $\mathbf{v}_{\text{гр}} = \partial E / \partial \mathbf{p}$  направлена перпендикулярно изоэнергетическим поверхностям, то пересекать границы зон Бриллюэна изоэнергетические поверхности (в том числе и по-



верхность Ферми) могут только под прямыми углами. Это означает что с увеличением радиуса  $p_F \rightarrow \pi\hbar/a$  сферическая поверхность Ферми (рис. 9.10) будет деформироваться.

Обратим внимание на то, что наличие эффективного потенциала и трансляция отрезка кривой  $E(p)$ , расположенного в первой зоне Бриллюэна, приводят к образованию первой энергетической зоны (см. рис. 9.9). Аналогичная трансляция отрезков кривых  $E(p)$ , расположенных во 2-й, 3-й и т.д. зонах Бриллюэна, приводит, соответственно, к образованию II, III и т.д. энергетических зон в спектре электронов.

Подчеркнем еще раз, что образование «полосатого» энергетического спектра, состоящего из областей разрешенных и запрещенных значений энергий, — фундаментальное свойство, причиной которого является брэгговское отражение электронных волн периодическими структурами.

**Задача 9.1.** Для одновалентного металла с простой кубической решеткой с периодом  $a = 3,3 \text{ \AA}$  определить *фермиевский импульс*  $p_F$  и минимальное расстояние  $\Delta p$  от поверхности Ферми до границы зоны Бриллюэна. Какая часть *зоны Бриллюэна* заполнена электронами? Найти отношение  $\Delta p / p_F$ .

**Решение:** Фермиевский импульс определяется соотношением (9.2):

$$p_F = \hbar \left( 3\pi^2 \cdot zN/V \right)^{1/3},$$

где  $V$  — объем кристалла,  $z$  — валентность металла,  $N$  — число атомов в кристалле. Учитывая, что  $z = 1$ ,  $N = V/a^3$ , выражение для импульса Ферми приводим к виду:

$$p_F = \frac{\hbar}{a} \left( 3\pi^2 \right)^{1/3} \approx 9,9 \cdot 10^{-25} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$$

Как и в одномерном, так и в данном трехмерном случае компоненты приведенных значений волновых векторов (9.19) и импульсов лежат в интервале значений  $-\pi/a \leq k_{x,y,z} \leq \pi/a$  и  $-\pi\hbar/a \leq p_{x,y,z} \leq \pi\hbar/a$  соответственно. Таким образом, первая зона Бриллюэна представляет собой в импульсном пространстве куб со стороной  $2\pi\hbar/a$ . Центр куба совпадает с началом системы координат  $\mathbf{p} = 0$  (рис. 9.10).

Поскольку центр сферы Ферми и центр кубической зоны Бриллюэна совпадают, то наиболее близко сфера Ферми подходит к границам зоны вдоль осей  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}_z$  и максимально удалена в направлении пространственных диагоналей куба. Следовательно, минимальное расстояние  $\Delta p$  от поверхности Ферми до границы зоны Бриллюэна равно:

$$\Delta p = \frac{\pi \hbar}{a} - p_F = \frac{\pi \hbar}{a} \left( 1 - \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \right) \approx 1,5 \cdot 10^{-26} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$$

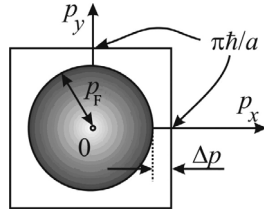


Рис. 9.10. У одновалентного металла с простой кубической решеткой сферическая поверхность Ферми отстоит от ближайшей грани квадратной зоны Бриллюэна со стороной  $2\pi\hbar/a$  на расстояние  $\Delta p \sim 0,015p_F$  (изображено без соблюдения масштаба).

Сфера Ферми близко подходит к грани кубической зоны Бриллюэна:

$$\frac{\Delta p}{p_F} = \frac{\left( 1 - (3/\pi)^{1/3} \right) \pi \hbar / a}{(3\pi^2)^{1/3} \hbar / a} = (\pi/3)^{1/3} - 1 \approx 0,015 = 1,5\%;$$

Разделив объем сферы Ферми  $4\pi p_F^3/3$  на объем зоны Бриллюэна  $(2\pi\hbar/a)^3$ , получаем

$$\frac{4\pi p_F^3/3}{(2\pi\hbar/a)^3} = \frac{1}{2}.$$

Следовательно, когда **на элементарную ячейку приходится один электрон**, то **электронами заполняется половина зоны Бриллюэна**.

**Ответ.**  $p_F \approx 9,9 \cdot 10^{-25} \text{ кг} \cdot \text{м/с}$ ,  $\Delta p \approx 1,5 \cdot 10^{-26} \text{ кг} \cdot \text{м/с}$ ,  $\Delta p / p_F \approx 0,015$ . Заполнена половина зоны Бриллюэна.

**Задача 9.2.** Энергия Ферми у кобальта  $E_F = 1,1$  эВ, температура плавления  $T_{\text{пл}} = 1492$  С. Оценить, какая доля электронов проводимости кобальта при температуре плавления находится в **возбужденных состояниях**. Воспользуйтесь следующими приближениями:

1) Для температур вблизи температуры плавления значение химического потенциала приблизительно равно значению энергии Ферми  $\mu \cong E_F$ .

2) Плотность состояний  $\rho(E)$  вблизи уровня Ферми слабо изменяется, то есть  $\rho(E) \cong \rho(E_F)$ .

3) При отличных от нуля температурах размытие ступеньки распределения Ферми–Дирака можно аппроксимировать линейной зависимостью.

**Решение.** Энергия Ферми (9.3) определяется полным числом валентных электронов, находящихся в зоне проводимости кобальта. Из (9.3) следует

$$n_0 = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (9.23)$$

Но если при  $T = 0$  К все электроны занимали состояния с энергиями  $E \leq E_F$ , то при  $T \neq 0$  К заполняется часть состояний с энергиями  $E \geq E_F$  с вероятностью, описываемой распределением Ферми–Дирака ((7.12), рис. 9.11).

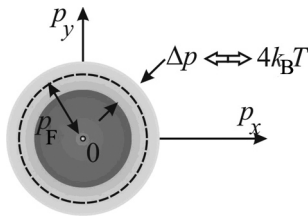


Рис. 9.11. «Размытие» сферы Ферми: в слое толщиной  $\Delta p$  (без соблюдения масштаба) имеются как свободные, так и занятые электронами состояния. Толщина этого слоя соответствует «размытию» по энергии  $\sim 4k_B T$ .

Концентрация электронов  $\Delta n$ , находящихся в возбужденных состояниях, то есть с энергиями  $E_F < E < E_F + 2k_B T$ , может быть вычислена по формуле

$$\Delta n = \int_{\mu}^{\mu+2k_B T} \rho(E) f(E) dE, \quad (9.24)$$

где  $\rho(E)$  — плотность состояний с энергией  $E$ ,  $f(E)$  — вероятность их заполнения (распределение Ферми–Дирака). Используя заданное в условии задачи приближение (3), функцию Ферми–Дирака заменяем ее линейной аппроксимацией

$f_{\text{lin}}(E) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{E - \mu}{2k_B T} \right]$  (7.13). Учитывая приближение (2) для плотности состояний (6.26), записываем выражение

$$\rho(E) \approx \rho(E_F) = \frac{\sqrt{2} m_0^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_F}. \quad (9.25)$$

В данных приближениях вычисляем концентрацию электронов  $\Delta n$ , находящихся в возбужденных состояниях:

$$\Delta n = \int_{\mu}^{\mu + 2k_B T} \rho(E) f(E) dE \approx \frac{\rho(E_F)}{2} \int_{\mu}^{\mu + 2k_B T} \left( 1 - \frac{E - \mu}{2k_B T} \right) dE = \frac{1}{2} \rho(E_F) k_B T. \quad (9.26)$$

С учетом (9.23), (9.26) и (9.25) доля возбужденных электронов равна:

$$\frac{\Delta n}{n_0} = \frac{3 k_B T}{4 E_F} = \frac{3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} (1492 + 273)}{4 \cdot 1,1 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \approx 0,104 = 10,4\%.$$

Таким образом, оценки показывают, что даже при температурах вблизи температуры плавления доля электронов, находящихся в возбужденных состояниях, невелика.

**Ответ.:**  $\frac{\Delta n}{n_0} \approx \frac{3k_B T}{4E_F} \approx 10\%.$

**Задача 9.3.** Оценить молярную **теплоемкость электронного газа** в металле с известной энергией Ферми. Показать, что теплоемкость электронов пропорциональна температуре. Размытие ступеньки распределения Ферми–Дирака при отличных от нуля температурах можно аппроксимировать линейной зависимостью (7.13). Считать, что плотность состояний  $\rho(E)$  вблизи уровня Ферми слабо изменяется, т. е.  $\rho(E) \cong \rho(E_F)$ , и значение химического потенциала совпадает с энергией Ферми  $\mu \cong E_F$ .

**Решение.** Для вычисления теплоемкости  $dU/dT$  необходимо знать тепловую энергию  $U$  всех электронов. Рассмотрим кристалл единичного объема.

**1-й способ оценки.** Для оценки внутренней энергии  $U$  будем считать, во-первых, что тепловой энергией обладают электроны, чья энергия  $E \geq E_F$ , и, во-вторых, их тепловая энергия — это

$u_T = E - E_F \equiv E - \mu$ . Тогда тепловая энергия электронов в этом объеме вычисляется аналогично (9.24) – (9.26):

$$U = \int_{\mu}^{\mu+2k_B T} (E - \mu) \rho(E) f(E) dE \approx \frac{\rho(E_F)}{2} \int_{\mu}^{\mu+2k_B T} \left(1 - \frac{E - \mu}{2k_B T}\right) (E - \mu) dE = \\ = \frac{1}{3} \rho(E_F) (k_B T)^2.$$

В выделенном нами единичном объеме находится  $n_0$  (9.23) электронов, то есть  $n_0/N_A$  молей. Поэтому внутренняя энергия моля электронов  $U_1 = \frac{N_A}{3n_0} \rho(E_F) (k_B T)^2$ . С учетом (9.23) и (9.25) находим оценочные выражения для внутренней энергии:

$$U_1 = \frac{N_A}{3n_0} \rho(E_F) (k_B T)^2 = \frac{N_A}{2} \frac{(k_B T)^2}{E_F}$$

и для молярной теплоемкости:

$$C = \frac{dU_1}{dT} = R \frac{k_B T}{E_F}. \quad (9.27)$$

**2-й способ оценки.** Электроны в металле вырождены. Это значит, что к ним не применимы распределение Максвелла–Больцмана и теорема о равномерном распределении энергии по кинетическим степеням свободы, которая позволяет легко рассчитать теплоемкость идеального газа. Однако в тепловых явлениях, так же как и в электропроводности, принимает участие только небольшая (по сравнению с полным числом валентных электронов) часть электронов – фермиевские электроны, которые можно рассматривать как идеальный газ и к которым можно применять теорему о равномерном распределении тепловой энергии.

Тепловой энергией  $3k_B T/2$  обладают только электроны, находящиеся в возбужденных состояниях (фермиевские электроны). Число таких электронов (9.26) определено в задаче 9.2. Таким образом, находим тепловую энергию фермиевских электронов:

$$U = \left[ \frac{3}{2} k_B T \right] \Delta n = \frac{3}{4} \rho(E_F) (k_B T)^2.$$

Используя (9.25) и (9.23), находим тепловую энергию одного моля фермиевских электронов  $U_1 = U \frac{N_A}{n_0} = \frac{9N_A}{8} \frac{(k_B T)^2}{E_F}$  и молярную теплоемкость

$$C = \frac{dU_1}{dT} = \frac{9}{4} \frac{k_B T}{E_F} R. \quad (9.28)$$

Точные расчеты молярной электронной теплоемкости дают значение

$$C = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{E_F} R. \quad (9.29)$$

**Замечание.** При нормальных условиях решеточная молярная теплоемкость металлов близка к  $3R$  по закону Дюлонга и Пти (задача 8.7). Поскольку в этих условиях  $k_B T \ll E_F$  (см. (9.29)), электронная теплоемкость пренебрежимо мала по сравнению с решеточной теплоемкостью. Однако при низких температурах, когда теплоемкость решетки подчиняется закону Дебая (8.45) и изменяется с температурой пропорционально  $\sim T^3$ , электронная теплоемкость может превышать решеточную.

**Ответ.:**  $C = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{E_F} R \sim T.$

**Задача 9.4.** Найти зависимость *коэффициента теплопроводности электронного газа* в металле от импульса Ферми, температуры и длины свободно пробега.

**Решение.** В теплопроводности, как и в электропроводности, принимают участие *только фермиевские электроны*. Рассматривая газ фермиевских электронов как идеальный, можно воспользоваться известным выражением для коэффициента теплопроводности идеального газа:

$$\chi = (1/3) \tilde{C} V_F \ell_\chi, \quad (9.30)$$

где  $\tilde{C} = (n/N_A) C_V$  — теплоемкость единицы объема,  $C_V$  — молярная теплоемкость,  $N_A$  — число Авогадро,  $n$  — полная концентрация коллективизированных электронов,  $\ell_\chi = v_F \tau_\chi$  — длина свободного

пробега,  $\tau_\chi$  – время свободного пробега (время релаксации) при переносе электронами тепла. Подставляя в (9.30) выражение для  $C_V$

(9.29) и учитывая, что  $n = 2 \frac{(4/3)\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3}$  и  $E_F = \frac{mv_F^2}{2}$ , находим зави-

симость коэффициента теплопроводности от импульса Ферми, длины свободного пробега электронов (времени релаксации) и температуры:

$$\chi = \frac{1}{3} \tilde{C} v_F \ell_\chi = \frac{1}{3} \left( \frac{n}{N_A} \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{E_F} R \right) v_F \ell_\chi = \frac{k_B^2}{9\hbar^3} p_F^2 T \ell_\chi.$$

**Ответ.**  $\chi = \frac{k_B^2}{9\hbar^3} p_F^2 T \ell_\chi.$

**Задача 9.5.** Определить **фермиевскую скорость** электронов в одномерном металле с одним электроном на элементарную ячейку и **законом дисперсии**  $E = E_0 [1 - \cos(k_x a)]$ , где  $E_0 = 0,5$  эВ и  $a = 3 \text{ \AA}$  (рис. 9.12).

**Решение.** Так как по определению скорость электрона  $v = dE / dp$ , а  $k = p / \hbar$ , то фермиевская скорость при законе дисперсии  $E = E_0 [1 - \cos(k_x a)]$  запишется в виде:

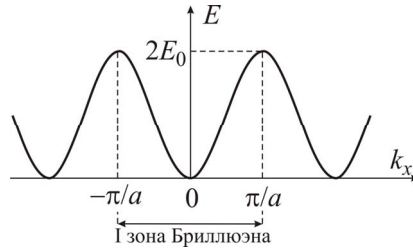


Рис. 9.12. Закон дисперсии электрона.

$$v_F = \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p=p_F} = \frac{1}{\hbar} E_0 a \sin \left( p_F \frac{a}{\hbar} \right).$$

В зависимости от топологической размерности фермиевский импульс  $p_F$  связан с концентрацией электронов  $n$  следующими соотношениями:

в трехмерном случае  $2 \frac{4\pi p_F^3 / 3}{(2\pi\hbar)^3} = n, \quad p_F = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad (9.31)$

$$\text{в двумерном} \quad 2 \frac{\pi p_F^2}{(2\pi\hbar)^2} = n, \quad p_F = \hbar(2\pi n)^{1/2}, \quad (9.32)$$

$$\text{в одномерном} \quad 2 \frac{p_F}{(2\pi\hbar)} = n, \quad p_F = \hbar \frac{\pi}{2} n \quad (9.33)$$

(формулы (9.31)–(9.33) получите самостоятельно, аналогично (6.22) и (6.23)).

Поскольку по условию задачи на элементарную ячейку приходится один электрон (энергетическая зона заполнена наполовину (задача 9.1)), то концентрация равна  $n = 1/a$ . Используя (9.33) для одномерного случая, находим скорость фермиевских электронов:

$$v_F = \frac{1}{\hbar} E_0 a \sin\left(p_F \frac{a}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar} E_0 a \sin\left(\frac{\pi\hbar}{2a} \cdot \frac{a}{\hbar}\right) v_F = \frac{1}{\hbar} E_0 a \approx 2,3 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$$

**Ответ.**  $v_F = E_0 a / \hbar = 2,3 \cdot 10^5 \text{ м/с}.$

**Задача 9.6.** Определить скорость электронов в двумерном металле с квадратной решеткой, если **закон дисперсии** электронов имеет вид  $E(p) = (p_x^2 + p_y^2)/2m$ . Площадь элементарной ячейки в плоскости решетки равна  $S = 0,85a^2$ ,  $a = 3 \text{ \AA}$ . Считать, что на элементарную ячейку приходится один валентный электрон, а масса электрона в зоне проводимости равна массе свободного электрона.

**Решение.** Учитывая, что для одновалентного металла концентрация равна  $n = 1/S$ , а также используя (9.32) из предыдущей задачи, получаем модуль скорости электронов на поверхности Ферми:

$$v_F = \sqrt{\left(\partial E / \partial p_x\right)^2 + \left(\partial E / \partial p_y\right)^2} \Big|_{p_F} = \frac{p_F}{m} = \frac{\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi}{S}} \approx 1,0 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$$

Фермиевский импульс можно найти иначе, определив сначала площадь **зоны Бриллюэна**, так как она связана с площадью элементарной ячейки в двумерном случае соотношением  $S_{\text{Бр}} = (2\pi\hbar)^2/S$ . По условию задачи на элементарную ячейку приходится один электрон. Энергетическая зона заполнена наполовину, и фермиевский импульс определяется из условия  $S_{\text{Бр}}/2 = \pi p_F^2$ .



**Ответ:**  $v_F = \frac{\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi}{S}} \approx 1,0 \cdot 10^6 \text{ м/с}.$

### §9.6. Электропроводность металлов. Квазиклассическое описание

Рассмотрим металл единичного объема со сферической поверхностью Ферми (подобные поверхности имеют металлы первой группы периодической системы элементов Менделеева) и квадратичным законом дисперсии

$$E = \frac{p^2}{2m^*}.$$

Пусть  $\tau$  – **время релаксации (время свободного пробега)** процессов рассеяния электронов на тепловых колебаниях решетки.

Пусть металл находится во внешнем электрическом поле с напряженностью  $\mathbf{E}$ , направленной по оси  $OX$ . Из уравнения движения для электрона  $dp/dt = -e\mathcal{E}$ , где  $(-e)$  – заряд электрона, следует, что *все электроны за время  $\tau$  приобретают дополнительный средний импульс*

$$\Delta p_J \equiv \Delta p_x = -e\mathcal{E}\tau. \quad (9.34)$$

Таким образом, поверхность Ферми целиком, как жесткий каркас, сдвигается на величину  $\Delta p_x$  (рис. 9.13 *a*). В результате сдвига электроны уходят из состояний в полумесяце 3, а заполняют состояния в полумесяце 1.

Выделим объем средней части ферми-шара (заштрихованная область на рис. 9.13), электроны которого не дают вклада в электропроводность, так как их суммарный импульс равен нулю. При этом остается еще один полумесяц 2, заполненный электронами, и граничащий с полумесяцем 1. Полумесяцы 1 и 2 имеют примерно одинаковые объемы вследствие малости смещения  $\Delta p_x$  по сравнению с  $p_F$  (см. §9.3, п.3). Электроны, заполняющие состояния в объемах 1 и 2, имеют нескомпенсированные импульсы и ответственные за электропроводность металлов. Таким образом, *электроны, создающие электрический ток, двигаются со скоростями, близкими к фермиевской скорости  $v_F$*  (на рис. 9.13 — влево).

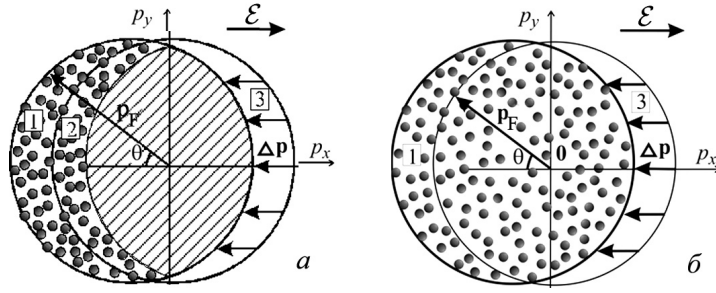


Рис. 9.13. *а* — сдвиг поверхности Ферми на  $-\Delta p_x$  в электрическом поле, направленном вдоль оси  $OX$ . В результате сдвига электроны уходят из состояний в полумесяце 3, а заполняют состояния в полумесяце 1. Электроны средней части ферми-шара (заштрихованная область) не дают вклада в электропроводность, так как для каждого электрона в этой области существует парный электрон с противоположным импульсом. *б* — модель Друде–Лоренца: смещение поверхности Ферми в электрическом поле с напряженностью  $\mathcal{E}$  на величину  $|\Delta \mathbf{p}| = \Delta p_J = e\mathcal{E}\tau$ .

Поэтому **длина свободного пробега** определяется скоростью Ферми  $v_F$  и временем свободного пробега  $\tau$ :

$$\ell = v_F \tau. \quad (9.35)$$

На основании изложенной модели в **приложении 9.1** выведена формула **Лифшица** (9.46) для плотности электрического тока:

$$j = \frac{2}{3} \frac{e^2 S_F \ell}{(2\pi\hbar)^3} \mathcal{E},$$

Учитывая, что площадь поверхности Ферми в  $\mathbf{p}$ -пространстве  $S_F = 4\pi p_F^2$ , формулу Лифшица можно записать в виде

$$j = \frac{8e^2 \pi p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} \frac{\tau}{m^*} \mathcal{E} = \sigma \mathcal{E},$$

где коэффициент электропроводности

$$\sigma = \frac{8e^2 \pi p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} \frac{\tau}{m^*}. \quad (9.36)$$

**В модели Друде–Лоренца** электроны описываются как газ свободных частиц и предполагается, что в электропроводности участвуют *все электроны* (рис. 9.13 *б*), и каждый электрон приобретает в электрическом поле с напряженностью  $\mathcal{E}$  среднюю дрей-

фовую скорость  $\Delta v_J = \Delta p_J / m = e\mathcal{E}\tau / m$ . Однако длина свободного пробега  $\ell = v_F \tau$  рассчитывается исходя из того, что **проводящие электроны движутся с фермиевскими скоростями**, как и в модели Лифшица ( $\tau$  — время свободного пробега).

Тогда плотность тока запишется в виде

$$j = en_0 \Delta v_J = \frac{e}{m} n_0 \Delta p_J = \frac{e^2}{m} n_0 \tau \mathcal{E} = e^2 n_0 \frac{\ell}{p_F} \mathcal{E}. \quad (9.37)$$

Полученное соотношение (9.37) соответствует дифференциальному закону Ома  $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$  с коэффициентом электропроводности

$$\sigma = e^2 n_0 \frac{\ell}{p_F} = e^2 n_0 \frac{\tau}{m^*} = \frac{8e^2 \pi p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} \frac{\tau}{m^*}. \quad (9.38)$$

В формуле (9.38) концентрация электронов  $n_0$  выражена через импульс Ферми  $p_F$  (9.31).

Сравнивая (10.36) и (10.38), можно сделать вывод, что в указанных приближениях обе модели приводят к одинаковым результатам.

**Задача 9.7.** Проводимость меди  $\sigma = 5,88 \cdot 10^7 (\text{ом} \cdot \text{м})^{-1}$ , концентрация электронов  $n = 8,45 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ . Вычислить длину свободного пробега  $\ell$  и время свободного пробега  $\tau$  электронов проводимости в меди. Сравнить полученное значение длины свободного пробега с межатомным расстоянием  $a = 3,61 \text{ \AA}$ , а время свободного пробега сравнить с периодом колебаний ( $\tau_0 \sim 10^{-13} \text{ с}$ ) ионов в узлах кристаллической решетки меди. Считать массу электрона проводимости равной массе свободного электрона.

**Решение.** Определив по формуле (6.24) энергию Ферми для меди

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30}} (3\pi^2 \cdot 8,45 \cdot 10^{28})^{2/3} =$$

$$= 11 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 7 \text{ эВ},$$

находим импульс Ферми (6.23):

$$p_F = \sqrt{2mE_F} = \hbar (3\pi^2 n)^{1/3} = 1,4 \cdot 10^{-24} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$$

Используя (9.38) и полученное значение  $p_F$ , находим длину  $\ell$  и время  $\tau$  свободного пробега:

$$\ell = \frac{\sigma p_F}{e^2 n} = \frac{\sigma \hbar (3\pi^2)^{1/3}}{e^2 n^{2/3}} = \frac{5,88 \cdot 10^7 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} (3\pi^2)^{1/3}}{(1,6 \cdot 10^{-19})^2 (8,45 \cdot 10^{28})^{2/3}} \approx 39 \text{ нм},$$

$$\tau = \frac{\sigma m}{e^2 n} = \frac{5,88 \cdot 10^7 \cdot 0,9 \cdot 10^{-30}}{(1,6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot 8,45 \cdot 10^{28}} \approx 2,4 \cdot 10^{-14} \text{ с}.$$

Таким образом, электроны в меди между актами рассеяния пролетают десятки межатомных расстояний

$$\frac{\ell}{a} \approx \frac{39}{0,36} \approx 100.$$

А время свободного пробега на порядок меньше характерного периода колебаний атомов в узлах кристаллической решетки:

$$\frac{\tau}{\tau_0} \approx \frac{2,4 \cdot 10^{-14}}{10^{-13}} \approx 0,1.$$

**Ответ:**  $\ell = \frac{\sigma \hbar (3\pi^2)^{1/3}}{e^2 n^{2/3}} \approx 39 \text{ нм}, \tau = \frac{\sigma m}{e^2 n} \approx 2,4 \cdot 10^{-14} \text{ с}.$

**Задача 9.8.** Для электронов в одномерном металле закон дисперсии:  $E = E_0[1 - \cos(k_x a)]$  (рис. 9.12), где  $k_x$  – волновой вектор электронов, а  $E_0$  и  $a$  – положительные константы. Металл находится в постоянном однородном электрическом поле с напряженностью  $\mathbf{E} = \mathcal{E} \mathbf{e}_x$ , направленной вдоль оси металла  $OX$ . Найти закон движения электрона, импульс которого в момент времени  $t_0$  равен нулю. Процессы рассеяния электронов не учитывать.

**Решение.** Уравнение движения электрона в постоянном электрическом поле:

$$\frac{dp_x}{dt} = q\mathcal{E}.$$

Разделяя переменные и интегрируя, с учетом начальных условий получаем зависимости импульса и волнового вектора электрона от времени:

$$p_x = q\mathcal{E}(t - t_0),$$

$$k_x = q\mathcal{E}(t - t_0) / \hbar.$$

Зная закон дисперсии, находим зависимости от времени энергии:

$$E = E_0[1 - \cos(k_x a)] = E_0 \left[ 1 - \cos \frac{q\mathcal{E}a(t-t_0)}{\hbar} \right],$$

скорости электрона

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk_x} = \frac{E_0 a}{\hbar} \sin(k_x a) = \frac{E_0 a}{\hbar} \sin \frac{q\mathcal{E}a(t-t_0)}{\hbar}$$

и координаты  $x(t)$  (закон движения):

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \int_{t_0}^t v_x(t) dt = x_0 + \int_{t_0}^t \frac{E_0 a}{\hbar} \sin \frac{q\mathcal{E}a(t-t_0)}{\hbar} dt = \\ &= x_0 + \frac{E_0}{q\mathcal{E}} \left[ 1 - \cos \frac{q\mathcal{E}a(t-t_0)}{\hbar} \right]. \end{aligned}$$

Электрон совершает колебательное движение, частота которого  $q\mathcal{E}a/\hbar$  определяется напряженностью электрического поля  $\mathcal{E}$ , а амплитуда  $E_0/(q\mathcal{E})$  зависит также и от ширины энергетической зоны  $2E_0$  (см. рис. 9.12).

**Ответ:**  $x(t) = x_0 + \frac{E_0}{q\mathcal{E}} \left[ 1 - \cos \frac{q\mathcal{E}a(t-t_0)}{\hbar} \right].$

### Приложение 9.1. Формула Лифшица

Как уже рассматривалось выше (§9.6), в электрическом поле поверхность Ферми смещается на величину  $\Delta p_x$ , зависящую от напряженности поля  $\mathcal{E}$  и времени свободного пробега  $\tau$ :  $\Delta p_J \equiv \Delta p_x = -e\mathcal{E}\tau$  (9.34).

Вычислим плотность электрического тока, создаваемого электронами одного из полумесяцев, например полумесяц  $I$  (см. рис. 9.13). Для вычисления количества электронов разобьем объем полумесяца на кольца, оси которых совпадают с осью  $OX$ . Радиус произвольно выбранного кольца равен  $p_F \sin \vartheta$ , ширина —  $p_F d\vartheta$ , площадь —  $dS = 2\pi p_F^2 \sin \vartheta d\vartheta$ , а толщина соответствует составляющей  $\Delta p_x$ , перпендикулярной  $dS$ :  $\Delta p_{x\perp} = \Delta p_x \cos \vartheta$  ( $\vartheta$  — угол между осью  $OX$  и направлением импульса электронов  $\mathbf{p}_F$ ). Объем кольца  $d\Omega = dS \cdot \Delta p_{x\perp}$ . Число электронов в кольце (удвоенное с учетом

разных направлений спина) равно числу элементарных квантовых состояний в объеме  $d\Omega$ :

$$dn = 2 \frac{d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{4\pi p_F^2 \cdot \Delta p_x}{(2\pi\hbar)^3} \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta = \frac{S_F \cdot \Delta p_x}{(2\pi\hbar)^3} \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta,$$

где  $S_F = 4\pi p_F^2$  – площадь поверхности Ферми в  $\mathbf{p}$ -пространстве.

Полное число электронов, занимающих состояния в полумес-цах 1 и 2 и принимающих участие в создании электрического тока, равно

$$\Delta n_J = 2 \int dn = \frac{2S_F \Delta p_x}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\pi/2} \sin \vartheta \cdot \cos \vartheta d\vartheta = \frac{S_F \Delta p_J}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (9.39)$$

Учитывая, что полное число коллективизированных электронов в сфере Ферми равно  $n_0 = 2 \frac{(4/3)\pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2}{3} \frac{S_F p_F}{(2\pi\hbar)^3}$ , выражение

(9.39) можно записать в виде

$$\Delta n_J = \frac{S_F \Delta p_J}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{3}{2} \frac{n_0}{p_F} \Delta p_J. \quad (9.40)$$

Вклад в плотность электрического тока электронов кольца равен

$$dj(\vartheta) = e \cdot dn \cdot v_x. \quad (9.41)$$

Поскольку в случае сферической поверхности Ферми скорость и импульс электронов направлены одинаково, то  $x$ -компонента скорости  $v_F$  электронов равна

$$v_x = v_F \cos \vartheta. \quad (9.42)$$

Заметим, что *среднее значение компоненты  $v_x$  для электронов в объемах 1 и 2 составляет 2/3 от скорости Ферми:*

$$\langle v_x \rangle = \frac{2}{\Delta n_J} \int_0^{\pi/2} v_x dn = \frac{2}{3} v_F. \quad (9.43)$$

С учетом (9.39) и (9.42) выражение (9.41) принимает вид

$$dj = e \cdot dn \cdot v_x = e \frac{S_F \cdot \Delta p_x}{(2\pi\hbar)^3} \cdot v_F \sin \vartheta \cdot \cos^2 \vartheta d\vartheta.$$

Суммируя плотность тока от всех колец и учитывая наличие второго полумесца, получаем выражение для полной плотности тока:

$$j = 2 \int dj = \frac{2eS_F v_F \Delta p_J}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\pi/2} \sin \vartheta \cdot \cos^2 \vartheta d\vartheta = \frac{2eS_F v_F \Delta p_J}{3(2\pi\hbar)^3}. \quad (9.44)$$

Используя (9.39) или (9.40), можно придать иной вид формуле (9.44) для плотности тока:

$$j = e \left[ \frac{S_F \Delta p_J}{(2\pi\hbar)^3} \right] \cdot \frac{2}{3} v_F = e \Delta n_J \cdot \frac{2}{3} v_F, \quad (9.45)$$

или

$$j = en_0 \cdot (\Delta p_J / m). \quad (9.46)$$

Формула (9.46) совпадает с (9.36), полученной в модели Друде–Лоренца.

С учетом  $\ell = v_F \tau$  (9.35) выражение (9.44) для плотности электрического тока запишется в виде:

$$j = \frac{2}{3} \frac{e^2 S_F \ell}{(2\pi\hbar)^3} \mathcal{E}. \quad (9.47)$$

Соотношение (9.47) впервые было получено И.М. Лифшицем и справедливо для изотропного закона дисперсии, когда  $E = f(p^2)$ . Квадратичный закон дисперсии представляет собой частный случай закона  $E = f(p^2)$ , так же как и линейный закон дисперсии, который можно представить в виде  $E = \pm \alpha(p^2)^{1/2}$ .

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D9.1.** Зависимость химического потенциала от температуры выражается приближенной формулой:

$$\mu \cong E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]. \text{ Найти для серебра отношение теплоемко-}$$

сти электронного газа к теплоемкости решетки при температуре 300 К. Температура Дебая для серебра  $T_D = 210$  К. Учесть, что в

формулу для среднего значения энергии электрона  $\langle E \rangle = 3\langle E_F \rangle / 5$  при температуре  $T \neq 0\text{ К}$  входит не энергия Ферми, а химический потенциал. Энергия Ферми у серебра  $E_F = 5,5\text{ эВ}$ .

**Ответ.**  $\frac{C_v}{C_p} = \frac{\pi^2}{6} \frac{k_B T}{E_F} \approx 8 \cdot 10^{-3}.$

**Задача D9.2.** Полагая электронный газ в металле идеальным, определить давление электронного газа при  $T = 0\text{ К}$ .

**Ответ.**  $P = \frac{2}{3} n \langle E \rangle = \frac{2}{5} n E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}}{5m} n^{5/3}.$

**Задача D9.3.** Используя значения коэффициентов электропроводности для меди  $\sigma_1 = 5,88 \cdot 10^7 (\text{ом} \cdot \text{м})^{-1}$  и для натрия  $\sigma_2 = 2,11 \cdot 10^7 (\text{ом} \cdot \text{м})^{-1}$  и энергий Ферми электронов  $E_{F1} = 7,00\text{ эВ}$  и  $E_{F2} = 3,23\text{ эВ}$ , найдите отношение длин свободного пробега электронов в этих металлах.

**Ответ.**  $\frac{\ell_1}{\ell_2} = \frac{\sigma_1 E_{F2}}{\sigma_2 E_{F1}} \approx 1,3.$

**Задача D9.4.** Какая доля свободных электронов в металле при температуре  $T = 0\text{ К}$  имеет энергию, отличающуюся от энергии Ферми не более чем на  $\alpha = 3\%$ .

**Ответ.**  $\frac{\Delta n}{n} = 1 - (1 - \alpha/100)^{3/2} \cong \frac{3\alpha}{200} = 0,045.$



## Глава 10

## ЭЛЕКТРОНЫ И ДЫРКИ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

## §10.1. Зонная структура полупроводников и диэлектриков

**Валентная зона** — наивысшая из разрешенных энергетических зон электронов твердого тела, в которой при температуре 0 К все энергетические состояния заняты. **Зона проводимости** — самая нижняя энергетическая зона в твердом теле, которая содержит свободные уровни в основном состоянии (не заполнена или содержит некоторое число носителей при  $T = 0$  К).

Рассмотрим случай, когда зона проводимости отделена от валентной зоны энергетической щелью шириной  $E_g$  (рис. 10.1).

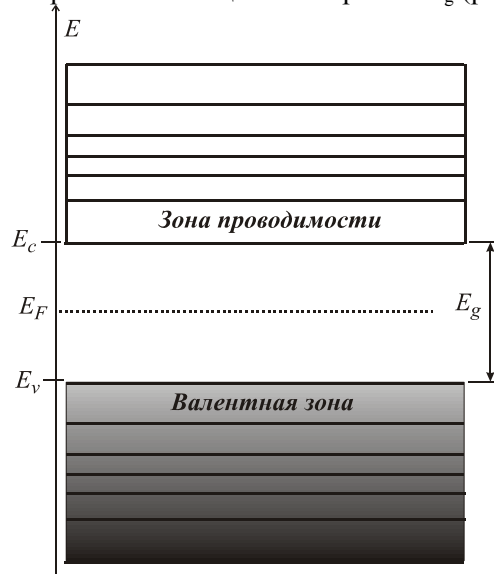


Рис. 10.1. Энергетический спектр изоляторов и полупроводников с полностью заполненной валентной зоной (затемнена) и полностью свободной зоной проводимости. Область запрещенных энергетических состояний (энергетическая щель шириной  $E_g$ ) находится между потолком валентной зоны  $E_v$  и дном зоны проводимости  $E_c$ :  $E_g = E_c - E_v$ .

Пусть при  $T = 0$  К в зоне проводимости все состояния свободны, а в валентной зоне — полностью заполнены электронами. Электроны валентной зоны не участвуют в электропроводности, так как все состояния в ней заполнены и электроны не могут изменить

свою энергию. В таком кристалле требуется конечная энергия возбуждения, не меньше ширины запрещенной зоны  $E_g$ , для перевода электронов вверх по энергии через энергетическую щель в зону проводимости. Если ширина запрещенной зоны  $E_g$  велика, так что ни температура, ни постоянное электрическое поле (и другие воздействия, которые не разрушают твердое тело) не могут сообщить электронам достаточную энергию для перехода в зону проводимости, то такое твердое тело не проводит электрический ток и является **изолятором**.

Если ширина запрещенной щели  $E_g$  невелика, то при конечной температуре  $T$  в результате тепловых флуктуаций некоторое число электронов переходит из валентной зоны в зону проводимости. Как электроны в зоне проводимости, так и **дырки** (свободные, незаполненные состояния), образовавшиеся в результате ухода электронов из валентной зоны, будут являться носителями тока и будут давать свой вклад в проводимость. С ростом температуры число перешедших в зону проводимости электронов (как и число дырок в валентной зоне) растет экспоненциально (по закону Больцмана). Вещества с таким энергетическим спектром, обладающие конечной электропроводностью, быстро возрастающей с ростом температуры, называются **полупроводниками**.

Удельное электрическое сопротивление полупроводников при комнатной температуре лежит в интервале от  $10^{-6}$  Ом·м до  $10^8$  Ом·м. По величине сопротивления они находятся между хорошими проводниками  $\sim (10^{-8} \div 10^{-6})$  Ом·м и изоляторами ( $>10^8$  Ом·м).

Если зона проводимости заполнена не полностью и электронов достаточно много, то концентрация носителей тока не будет зависеть от температуры. Такие вещества являются **металлами**.

В середине XX века были открыты так называемые **бесщелевые полупроводники**, занимающие промежуточное положение между металлами, у которых энергетические зоны перекрываются, и полупроводниками, у которых зоны разделены энергетической щелью. Бесщелевой полупроводник можно рассматривать как предельный случай металлического состояния с вырожденной в точку поверхностью Ферми, или как полупроводник с нулевой шириной запрещенной зоны. Бесщелевые полупроводники обладают целым рядом необычных свойств, в частности, аномально (рекордно) малыми эффективными массами носителей тока и огромными подвижностями носителей заряда.

Число электронов в кристалле определяется валентностью атомов. **Валентность и электропроводящие свойства** вещества связаны между собой.

1) *Одновалентные* щелочные металлы (Li, Na, K, Rb, Cs) и благородные металлы (Cu, Ag, Au) являются хорошими проводниками, так как  $N$  электронов заполняют половину зоны Бриллюэна, в которой может находиться  $2N$  электронов с противоположными спинами ( $N$  – число атомов). Зона проводимости указанных металлов заполнена наполовину.

2) *Двухвалентные* вещества не являются изоляторами благодаря перекрытию энергетических зон. Перекрытие зон создает условия хорошей металлической проводимости всех двухвалентных веществ, за исключением Sr и Br, которые являются плохими проводниками из-за слабого перекрытия зон.

3) В *трехвалентных* веществах, таких как Al, Ga, In, Tl, электроны ( $3N$ ) полностью заполняют одну зону (валентную энергетическую зону) и половину второй зоны — зоны проводимости. Поэтому эти вещества относятся к металлам.

4) Перекрытие зон приводит к тому, что среди *четырехвалентных* веществ встречаются все типы проводимости: изоляторы, полупроводники, полуметаллы и металлы. Четырехвалентный углерод существует или в виде *алмаза* (со столь широкой запрещенной зоной, что его практически можно считать изолятором), или в виде *графита*, являющегося полуметаллом (с малым перекрытием валентной зоны и зоны проводимости). *Кремний и германий* – типичные полупроводники. *Олово* в одной фазе представляет собой металл, а в другой – полупроводник. *Свинец* – типичный металл.

5) *Пятивалентные* элементы As, Sb, Bi должны бы быть хорошими проводниками с двумя полностью и одной наполовину заполненными зонами. Однако кубическая решетка этих элементов оказывается неустойчивой относительно ромбоэдрической деформации. Происходит небольшой сдвиг подрешеток; зона Бриллюэна, изменяя форму, уменьшается в объеме в два раза. Теперь для заполнения электронами с противоположными спинами одной зоны требуется только  $N$  электронов. Таким образом,  $5N$  электронов полностью заполняют пять энергетических зон. Однако это не приводит к диэлектризации, так как верхняя полностью заполненная валентная зона перекрывается со свободной зоной проводимости.

На рис. 10.2 представлен энергетический спектр Bi. Потолок пятой энергетической зоны в точках T (их две) зоны Бриллюэна,

которая по форме близка к кубооктаэдру, расположен выше по шкале энергии, чем дно зоны проводимости (шестой энергетической зоны) в точках L (их всего шесть). Электроны из экстремума T перетекают в состояния с меньшей энергией, расположенные в точках L. В точках L образуются три электронные поверхности Ферми эллипсоидальной формы, а в точках T — одна дырочная поверхность.

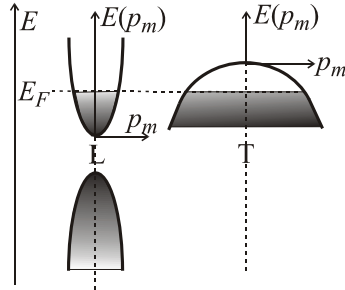


Рис. 10.2. Энергетический спектр полуметалла  $\text{Bi}$ , в котором потолок валентной зоны в точках T (их две) зоны Бриллюэна расположен выше дна зоны проводимости в точках L (их всего шесть). Число свободных состояний в экстремуме T равно числу занятых электронами состояний в точках L.

Такие вещества с равным числом электронов и дырок, образованных за счет перекрытия зон, называются **полуметаллами**.

### §10.2. Концентрация носителей заряда и химический потенциал в полупроводниках с собственной проводимостью

В полупроводнике с собственной проводимостью, например в германии, каждый атом германия образует ковалентные связи с четырьмя соседними атомами. На каждую связь атом отдает один электрон. Эти связующие электроны сосредоточены на линиях связи (линиях, соединяющих соседние атомы). По энергии связующие электроны находятся в валентной зоне. Под воздействием температуры один из связующих электронов может «оторваться». Тогда он получает возможность свободно перемещаться по всему объему полупроводника. Энергетически оторвавшийся электрон находится в зоне проводимости.

На освободившееся место (дырку) на связи может переместиться электрон с другой связи. Таким образом, дырка также может перемещаться по всему полупроводнику. По энергии дырки находятся в валентной зоне.

Дырки формируют собственную дырочную энергетическую зону со своим законом дисперсии. Поэтому в зонной модели, при отличных от нуля температурах, спектр собственного полупроводника (полупроводника с собственной проводимостью) состоит из двух зон: зоны проводимости, слабо заполненной реальными электронами, и почти заполненной валентной зоны, разделенных энергетической щелью  $E_g$ .

**Собственный полупроводник** — это идеально чистый полупроводник, в котором при температуре  $T = 0$  К валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости — свободна. Под действием температуры (или при оптическом возбуждении) часть электронов из валентной зоны «перебрасывается» в зону проводимости, в результате чего образуется равное количество электронов и дырок.

Вычислим концентрации электронов  $n_c$  и дырок  $n_v$  при  $T \neq 0$  К. Будем отсчитывать энергию электронов  $\varepsilon_c$  от дна зоны проводимости  $E_c$  вверх, а энергию дырок  $\varepsilon_v$  от потолка валентной зоны  $E_v$  вниз по энергии (рис. 10.3).

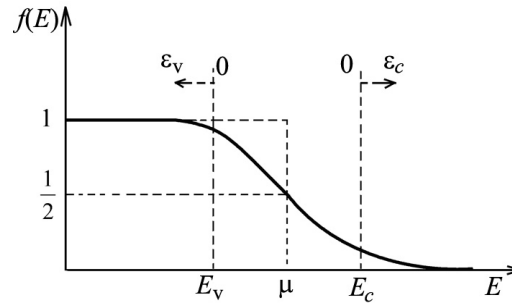


Рис. 10.3. Ферми-распределение вблизи уровня химического потенциала между потолком валентной зоны  $E_v$  и дном зоны проводимости  $E_c$ .

Тогда концентрацию электронов  $n_c$  в зоне проводимости и дырок  $n_v$  в валентной зоне при  $T \neq 0$  можно записать в виде (используя (9.6)):

$$n_c = \int_0^{\infty} f(E_c + \varepsilon_c) \rho_c(\varepsilon_c) d\varepsilon_c, \quad (10.1)$$

$$n_v = \int_0^{\infty} [1 - f(E_v - \varepsilon_v)] \rho_v(\varepsilon_v) d\varepsilon_v, \quad (10.2)$$

где  $f(E)$  — функция распределения Ферми–Дирака (7.12),  $[1 - f(E_v - \varepsilon_v)]$  — вероятность *незаполнения электроном* состояния с энергией  $E = E_v - \varepsilon_v$ , т. е. вероятность обнаружения дырки в этом состоянии,  $\rho_c, \rho_v$  — плотности состояний в зоне проводимости и в валентной зоне, соответственно.

Далее учтем интересную особенность функции Ферми–Дирака, а именно: вероятность найти дырку на энергетическом уровне, находящемся на расстоянии  $\delta$  *ниже* уровня химического потенциала  $\mu$ , равна вероятности найти электрон с энергией на  $\delta$  *выше* уровня  $\mu$  (см. задачу 7.2), то есть

$$1 - f(\mu - \delta) = f(\mu + \delta). \quad (10.3)$$

Используя (10.3), преобразуем выражение (10.2):

$$1 - f(E_v - \varepsilon_v) = 1 - f[\mu - (\varepsilon_v - E_v + \mu)] = f(\varepsilon_v + 2\mu - E_v).$$

Тогда можно записать:

$$n_v = \int_0^{\infty} f(\varepsilon_v + 2\mu - E_v) \rho_v(\varepsilon_v) d\varepsilon_v. \quad (10.4)$$

Как будет показано ниже, уровень химического потенциала  $\mu$  лежит в области энергетической щели, то есть между потолком валентной зоны  $E_v$  и дном зоны проводимости  $E_c$ .

При  $k_B T \ll E_g = E_c - E_v$  как электронный газ, так и дырочный **не вырождены**, а, следовательно, функция распределения имеет бoльцмановский вид (9.11):

$$f(E) = \exp[-(E - \mu)/(k_B T)].$$

Используя также для плотности состояний выражение

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}, \text{ вычислим концентрацию электронов:}$$

$$\begin{aligned} n_c &= \frac{\sqrt{2}m_c^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_c + E_c - \mu}{k_B T}\right) \sqrt{\varepsilon_c} d\varepsilon_c = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu - E_c}{k_B T}\right) (k_B T)^{3/2} \int_0^{\infty} e^{-z} \sqrt{z} dz. \end{aligned}$$

Полученный интеграл  $\left( \int_0^{\infty} e^{-z} z^{t-1} dz = \Gamma(t) \right)$  — гамма-функция

представляет собой интеграл Эйлера  $\Gamma(1,5)$  второго рода. Учитывая свойство гамма функции  $\Gamma(t+1) = t \cdot \Gamma(t)$  и ее значение  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$  при  $t = 1/2$ , получаем  $\Gamma(1,5) = \sqrt{\pi}/2$ . Окончательное выражение для концентрации электронов записывается в виде:

$$n_c = 2 \left( \frac{m_c k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{\mu - E_c}{k_B T} \right). \quad (10.5)$$

Аналогично для концентрации дырок получаем

$$n_v = 2 \left( \frac{m_v k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{-\mu + E_v}{k_B T} \right). \quad (10.6)$$

Произведение концентраций (10.5) и (10.6)

$$n_c n_v = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^3 (m_c m_v)^{3/2} \exp \left( -\frac{E_g}{k_B T} \right) \quad (10.7)$$

не зависит от положения уровня химического потенциала.

**В чистом полупроводнике** с собственной проводимостью концентрации электронов и дырок равны. Извлекая корень из (10.7), находим:

$$n_c = n_v = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) = n_0 \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) \quad (10.8)$$

где

$$n_0 = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4}. \quad (10.9)$$

Таким образом, концентрация собственных носителей в полупроводнике (10.8) зависит как от температуры, так и от ширины запрещенной зоны, и не зависит от положения уровня химического потенциала.

Приравнявая (10.5) и (10.6), получаем значение химического потенциала в полупроводниках с собственной проводимостью:

$$\mu = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_v}{m_c}. \quad (10.10)$$

Из (10.10) следует, что *при абсолютном нуле температуры уровень химического потенциала находится точно посередине между дном зоны проводимости и вершиной валентной зоны*. То же положение он занимает и при конечных температурах, если  $m_c = m_v$ . Если эффективные массы электронов и дырок не равны, то с ростом температуры уровень химического потенциала смещается в сторону зоны с меньшей эффективной массой.

Используя **термодинамическое определение химического потенциала** (см. §9.2), можно на качественном уровне показать, что уровень Ферми в чистых полупроводниках лежит в запрещенной зоне. Химический потенциал для электронной системы равен среднему вероятностному изменению энергии системы при изменении числа частиц на единицу, то есть на один электрон. Если *при температуре*  $T = 0$  К добавить в собственный полупроводник один электрон ( $\Delta N = 1$ ), то он займет самое низкое свободное энергетическое состояние с энергией  $E_c$ . В то же время при уменьшении числа частиц на единицу ( $\Delta N = -1$ ) энергия системы уменьшится на  $E_v$ . Таким образом, среднее изменение энергии системы будет равно  $\mu = (E_c + E_v)/2$ . Поэтому, независимо от различия эффективных масс, при  $T = 0$  К химический потенциал всегда лежит точно в середине запрещенной зоны.

При температуре  $T \neq 0$  К ступенька распределения Ферми–Дирака размыта (рис. 10.4 а), поэтому в зоне проводимости могут появиться электроны, а в валентной зоне — дырки (свободные состояния).

Рассмотрим случай, когда эффективная масса дырок  $m_v$  меньше, чем эффективная масса электронов  $m_c$ . Соответствующие данному случаю плотности состояний (10.4) электронов и дырок изображены на рис. 10.4 б. Если бы уровень химического потенциала остался в середине запрещенной зоны (рис. 10.4), то заполнение зон соответствовало бы изображенным на рис. 10.4 в функциям заполнения  $dn_v/dE$  и  $dn_c/dE$  (9.6). При этом, как видно на рис. 10.4 в, заштрихованные площади в валентной зоне и зоне проводимости, равные числу носителей в этих зонах, не одинаковые. Этого быть не может, так как в чистом полупроводнике число электронов в зоне проводимости должно быть равно числу дырок в валентной зоне.



Данное противоречие устраняется, если сдвинуть уровень химического потенциала к потолку валентной зоны, то есть в сторону легких носителей заряда (рис. 10.5 а–в). Величина сдвига химического потенциала  $\mu$  должна точно соответствовать условию равенства концентраций электронов и дырок  $n_c = n_v$ .

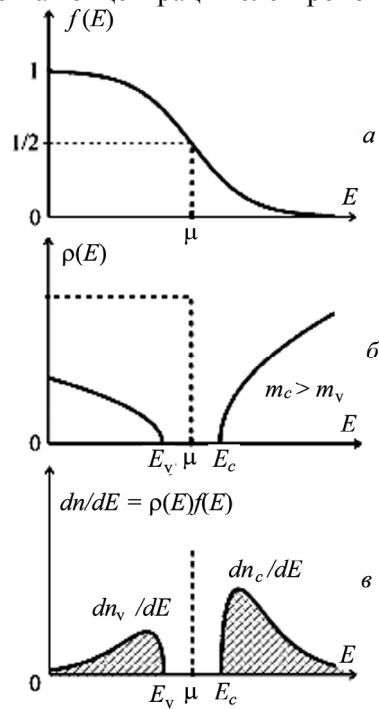


Рис. 10.4. Зависимости от энергии  $E$  вероятности заполнения электронами состояний  $f(E)$  (а) плотности состояний (б) и плотности заполнения уровней энергии  $dn/dE$  (в) для случая  $m_c < m_v$ .

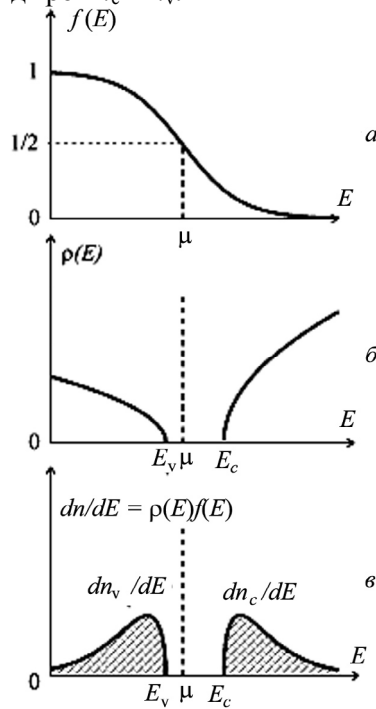


Рис. 10.5. Условие равенства концентраций электронов и дырок  $n_c = n_v$  (равенство заштрихованных площадей (в) в валентной зоне и зоне проводимости) требует смещения уровня химического потенциала, изображенного на рис. 10.4, в сторону зоны с меньшей эффективной массой.

Рассмотрим положение химического потенциала  $\mu$  при  $T \neq 0$  К, основываясь на его *термодинамическом определении*. Вносим один электрон. Он может занять одно из свободных электронных состояний, для которых  $f(E) \neq 0$ . Благодаря размытию ступеньки распределения Ферми–Дирака электрон может оказаться как в валент-

ной зоне, так и в зоне проводимости. При этом химический потенциал следует рассматривать как среднюю энергию вносимого электрона. Среднюю энергию вносимого электрона в валентной зоне и зоне проводимости можно оценить по максимуму функций заполнения  $dn/dE$  в этих зонах. Максимум  $dn_c/dE$  тяжелых электронов находится ближе к дну зоны проводимости, чем максимум легких дырок к потолку валентной зоны. Отсюда следует, что химический потенциал сдвинут в сторону более легких носителей заряда.

Чем больше различие в эффективных массах, тем больше этот сдвиг. При равных массах  $m_c = m_v$  химический потенциал остается в середине запрещенной зоны.

**Задача 10.1.** Ширина энергетической щели в германии  $E_g \approx 0,75$  эВ. При какой максимальной длине волны германий начнет поглощать свет?

**Решение.** Поглощая фотон, электрон должен перейти в состояние с энергией, большей чем энергия исходного состояния на величину энергии фотона. Электроны валентной зоны могут изменить свою энергию как минимум на ширину энергетической щели  $E_g$ . Поэтому поглощение электромагнитных волн возможно только при энергии фотонов  $\hbar\omega \geq E_g$ . При поглощении фотона с такой энергией образуется пара носителей заряда: электрон в зоне проводимости и дырка в валентной зоне. Минимальная энергия фотона, равная  $E_g$ , — это минимальная энергия образования электрон-дырочной пары в полупроводнике с собственным типом проводимости.

Используя закон дисперсии фотонов  $\omega = ck$  и соотношение  $k = 2\pi/\lambda$ , окончательно находим  $\lambda \leq 2\pi\hbar c / E_g = 1,6 \cdot 10^{-6}$  м; красная граница фотопроводимости  $\lambda_{\max} = 2\pi\hbar c / E_g = 1,6 \cdot 10^{-6}$  м.

**Ответ.**  $\lambda = 2\pi\hbar c / E_g = 1,6 \cdot 10^{-6}$  м.

**Задача 10.2.** Во сколько раз изменится концентрация электронов в собственном невырожденном полупроводнике при изменении температуры от  $T_1 = 200$  К до  $T_2 = 300$  К, если ширина запрещенной зоны изменяется по закону  $E_g = (\Delta - \alpha T)$ , где  $\Delta = 0,785$  эВ — ши-

рина запрещенной зоны при температуре  $T = 0 \text{ K}$ ,  
 $\alpha = 4 \cdot 10^{-4} \text{ эВ / K}$  ?

**Решение.** Используя соотношение (10.8) и условие задачи, находим выражение для концентрации электронов (и дырок):

$$\begin{aligned} n_c = n_v &= 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) = \\ &= 2 \left[ (m_c m_v)^{1/2} \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right]^{3/2} \cdot \exp \left[ -\frac{\Delta - \alpha T}{2k_B T} \right], \end{aligned} \quad (10.11)$$

и отношение концентраций при изменении температуры от  $T_1 = 300 \text{ K}$  до  $T_2 = 200 \text{ K}$ :

$$\begin{aligned} \frac{n_2}{n_1} &= \left( \frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{\Delta}{2k_B} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \right] = \\ &= \left( \frac{300}{200} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{\Delta}{2k_B} \left( \frac{1}{300} - \frac{1}{200} \right) \right] = 3,6 \cdot 10^3. \end{aligned} \quad (10.12)$$

**Ответ.**  $\frac{n_2}{n_1} = \left( \frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{\Delta}{2k_B} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \right] = 3,6 \cdot 10^3.$

**Задача 10.3.** При изменении температуры от  $T_1$  до  $T_2$  проводимость чистого (беспримесного) полупроводника возрастает в  $\alpha$  раз. Определите ширину запрещенной зоны.

**Решение.** Для плотности тока  $j$  в беспримесном полупроводнике можно использовать то же соотношение, что и для металла (§9.6, (9.36)):

$$j = en\Delta V_J = \frac{e}{m} n \Delta p_J = \frac{e^2}{m} n \mathcal{E} \tau,$$

где  $\Delta V_J$ ,  $\Delta p_J$  – приобретаемые в электрическом поле с напряженностью  $\mathcal{E}$  скорость и импульс направленного движения,  $\tau$  – время свободного пробега,  $n$  – полная концентрация электронов и дырок.

Зависимость проводимости

$$\sigma = \frac{e^2}{m} n \tau \quad (10.13)$$

от температуры у беспримесного полупроводника, в отличие от металла, связана, главным образом, не с временем  $\tau$ , а с концентрацией  $n$ :

$$n = 2n_{c,v} = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) = n_0 \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right), \quad (10.14)$$

где  $n_0 = 4 \left( \frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4}$ . Зависимостью коэффициента  $n_0$  от температуры можно пренебречь по сравнению с экспоненциальной зависимостью  $n(T)$ . Тогда для проводимости беспримесного полупроводника получаем

$$\sigma = \frac{e^2 \tau}{m} n = \frac{e^2 \tau}{m} n_0 \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) = \sigma_0 \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right). \quad (10.15)$$

По условию задачи  $\frac{\sigma_2}{\sigma_1} = \alpha$ , поэтому

$$E_g = 2k_B \frac{T_1 T_2}{T_2 - T_1} \ln \alpha.$$

**Ответ.**  $E_g = 2k_B \frac{T_1 T_2}{T_2 - T_1} \ln \alpha.$

**Задача 10.4.** По данным измерения эффекта Холла, концентрация электронов в полупроводнике при температуре  $T_1 = 400$  К равна  $n_1 = 1,3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , а при температуре  $T_2 = 350$  К равна  $n_2 = 6,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Определить ширину запрещенной зоны полупроводника при температуре  $T = 0$  К, считая, что она изменяется с температурой по линейному закону.

**Решение.** Используя линейную зависимость ширины запрещенной зоны от температуры  $E_g = E_{g0} - \alpha T$  при температурах  $T_1$  и  $T_2$ , получаем систему двух уравнений:

$$E_{g1} = E_{g0} - \alpha T_1,$$

$$E_{g2} = E_{g0} - \alpha T_2,$$

из которых находим

$$E_{g0} = \frac{T_2 E_{g1} - T_1 E_{g2}}{T_2 - T_1}. \quad (10.16)$$

Для определения ширины запрещенных зон при температурах  $T_1$  и  $T_2$  используем (10.8):

$$E_{g1} = 2kT_1 \ln \left[ \frac{n_1 (2\pi\hbar^2)^{3/2}}{2(k_B T_1)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4}} \right],$$

$$E_{g2} = 2kT_2 \ln \left[ \frac{n_2 (2\pi\hbar^2)^{3/2}}{2(k_B T_2)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4}} \right].$$

Подставляя полученные значения в (10.16), находим

$$E_{g0} = 2k_B T_1 T_2 (T_1 - T_2)^{-1} \ln \left( \frac{n_1 T_2^{3/2}}{n_2 T_1^{3/2}} \right) =$$

$$= 2k_B 400 \cdot 350 (400 - 350)^{-1} \ln \left( \frac{13 \cdot (350 / 400)^{3/2}}{6,2} \right) = 0,26 \text{ эВ}.$$

**Ответ.**  $E_{g0} = 2k_B T_1 T_2 (T_1 - T_2)^{-1} \ln \left( \frac{n_1 T_2^{3/2}}{n_2 T_1^{3/2}} \right) = 0,26 \text{ эВ}.$

**Задача 10.5.** На рисунке 10.6 приведен график зависимости логарифма удельной проводимости от обратной температуры  $1/T$  для полупроводника, слабо легированного донорными примесями (полупроводника  $n$ -типа). Оцените ширину запрещенной зоны полупроводника и энергию активации.

**Примечание.** Легированный полупроводник  $n$ -типа содержит примесные атомы — **доноры**, у которых число валентных электронов на единицу больше, чем у атомов основной матрицы. «Лишний» электрон примесного атома не участвует в образовании ковалентных связей. Энергетический уровень, на котором при  $T = 0 \text{ К}$  находится этот электрон, расположен в запрещенной зоне полупроводника, под дном зоны проводимости (рис. 10.7) и называется **донорным** уровнем. Этот уровень энергии «привязан» только к месту расположения примеси и поэтому называется **локализованным**.

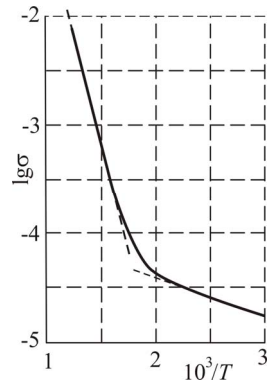


Рис. 10.6. Зависимость логарифма удельной проводимости от обратной температуры для полупроводника, слабо легированного донорными примесями (полупроводника  $n$  типа).

При слабом легировании, когда донорные примеси не взаимодействуют друг с другом, все донорные электроны имеют одну и ту же энергию (см. рис. 10.7). При температурах, отличных от нуля ( $T \neq 0$  К), электроны с локальных примесных уровней могут перемещаться в зону проводимости. Для этого требуется энергия  $E_a$ , называемая **энергией активации**, которая в десятки раз меньше, чем ширина запрещенной зоны  $E_g$

полупроводника.

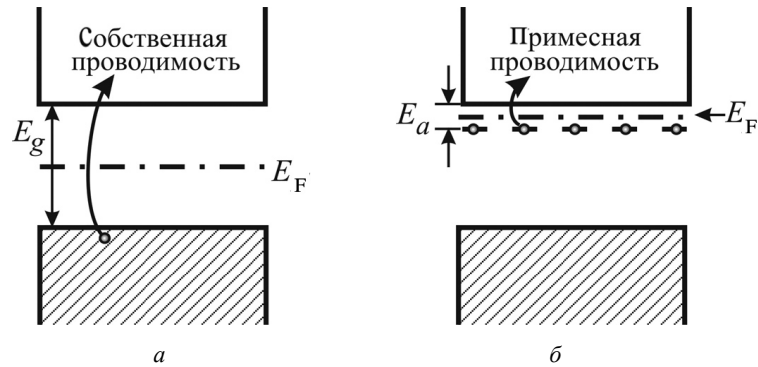


Рис. 10.7.  $a$  — зонная структура чистого полупроводника. Уровень Ферми  $E_F$  расположен в середине запрещенной зоны  $E_g$ . При  $T \neq 0$  К осуществляется собственная проводимость за счет перехода (указан стрелкой) электронов из валентной зоны (заштрихована) в зону проводимости.  $b$  — зонная структура полупроводника слабо легированного донорными примесями. Донорные уровни расположены ниже дна зоны проводимости на энергию  $E_a$ . Примесная проводимость осуществляется за счет переходов (указаны стрелкой) электронов с донорных уровней в зону проводимости.

При наличии примесей электропроводность выражается формулой:

$$\sigma = \sigma_{0a} \exp\left(-\frac{E_a}{2k_B T}\right) + \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right). \quad (10.17)$$

Первое слагаемое отражает переходы с примесных уровней в зону проводимости — **примесная проводимость** (рис. 10.7б), которая наблюдается при низких температурах. Второе слагаемое описывает **собственную проводимость** (рис. 10.7а), которая имеет место при более высоких температурах, когда электроны в зону проводимости переходят из валентной зоны полупроводника.

**Решение.** На графике (рис. 10.6) можно выделить две линейные зависимости. Низкотемпературная линейная зависимость связана с активацией электронов с донорных уровней, высокотемпературная — с собственной проводимостью.

Высокотемпературный участок графика (10.17) можно записать в виде  $\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{E_g}{2k_B T}$  или в десятичных логарифмах

$$\lg \sigma = \lg \sigma_0 - 0,43 \frac{E_g}{2k_B T}. \quad (10.18)$$

По наклону прямой зависимости  $\lg \sigma$  от  $1/T$  к оси абсцисс определяется  $\operatorname{tg} \varphi \approx -4 \cdot 10^3$ . И по формуле  $\operatorname{tg} \varphi = -0,43/(2k_B) E_g$ , следующей из (10.18), вычисляется  $E_g$ :  $E_g = -2k_B \operatorname{tg} \varphi / 0,43 \approx 1,6 \text{ эВ}$ .

Аналогично, определяя тангенс угла наклона  $\operatorname{tg} \varphi_a \approx 32,5$  для низкотемпературного участка зависимости  $\lg \sigma$  от  $1/T$ , получаем значение энергии активации:  $E_a = -\frac{2k_B \operatorname{tg} \varphi_a}{0,43} \approx 0,013 \text{ эВ}$ .

**Ответ.**  $E_g \approx 1,6 \text{ эВ}$ ,  $E_a \approx 0,013 \text{ эВ}$ .

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D10.1.** Вычислить собственные концентрации электронов  $n$  в германии Ge и в кремнии Si при  $T = 300 \text{ К}$ . Эффективную массу электронов в валентной зоне для Ge считать равной  $m_v(\text{Ge}) = 0,36m_0$ , а в зоне проводимости  $m_c(\text{Ge}) = 0,55m_0$ , а для Si

–  $m_v(\text{Si}) = 0,59m_0$ ,  $m_c(\text{Si}) = 1,10m_0$ . Ширина запрещенной зоны при  $T = 300\text{ К}$  в Ge составляет  $E_g(\text{Ge}) = 0,66\text{ эВ}$ , а в Si –  $E_g(\text{Si}) = 1,11\text{ эВ}$ .

**Ответ.**

$$n_c(\text{Ge}) = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) = 2,2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3},$$

$$n_c(\text{Si}) = 2 \left( \frac{k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_c m_v)^{3/4} \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) = 1,05 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}.$$

**Задача D10.2.** В некотором чистом полупроводнике эффективная масса дырок значительно превосходит эффективную массу электронов. Где располагается величина химического потенциала относительно середины запрещенной зоны при температуре  $T$ ?

**Ответ.** Химический потенциал будет ближе к дну зоны проводимости, так как  $\mu = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_v}{m_c}$ .

**Задача D10.3.** Получить формулу для концентрации электронов проводимости в невырожденном полупроводнике с заданным значением химического потенциала  $\mu$  при температуре  $T$ .

**Ответ.**  $n_c = 2 \left( \frac{m_c k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{\mu - E_c}{k_B T} \right).$

**Задача D10.4.** Концентрация электронов в собственном полупроводнике при температуре  $T=400\text{ К}$  равна  $n = 1,38 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Найти произведение эффективных масс электрона и дырки, если ширина запрещенной зоны изменяется с температурой по закону  $E_g = (\Delta - \alpha T)$ , где  $\Delta = 0,785\text{ эВ}$ ,  $\alpha = 4 \cdot 10^{-4} \text{ эВ/К}$ .

**Ответ.**  $\frac{m_n m_p}{m_0^2} = \left( \frac{2\pi\hbar^2}{k_B T} \right)^2 \left( \frac{n}{2} \right)^{4/3} \frac{1}{m_0^2} \exp \left( \frac{2(\Delta - \alpha T)}{3k_B T} \right) = 0,21.$



## Глава 11

КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ  
И В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ

## §11.1. Квантование магнитного потока

## 11.1.1. Канонический импульс

В квантовой механике различаются две импульсные величины.

1) Кинетический импульс:  $m\mathbf{v}$ , определяющий кинетическую энергию  $E = \frac{(mv)^2}{2m}$ , где  $m$  – масса частицы.

2) **Канонический импульс**, который определяет длину волны де Бройля частицы (2.1)

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|\mathbf{p}|}. \quad (11.1)$$

По условию квантования Бора (см. §3.1) на длине боровской орбиты укладывается целое число длин волн. Для круговой орбиты радиуса  $r$

$$2\pi r = n\lambda,$$

где  $n$  — целое число. Подставляя выражение для  $\lambda$  (11.1), находим  $2\pi r|\mathbf{p}| = 2\pi\hbar \cdot n$ . Для орбиты произвольной формы это соотношение записывается в виде (постулата Бора–Зоммерфельда (3.3))

$$\oint p d\ell = 2\pi\hbar \cdot n. \quad (11.2)$$

В квантовой механике квантуется канонический импульс, так как его величина не зависит от наличия магнитного поля.

Найдем, как связаны канонический ( $\mathbf{p}$ ) и кинетический ( $m\mathbf{v}$ ) импульсы частицы. Рассмотрим частицу с зарядом  $q$ , движущуюся в отсутствие магнитного поля со скоростью  $\mathbf{v}$ .

Пусть магнитное поле с индукцией  $\mathbf{B}$  вводится за время  $\tau$ . Согласно уравнению Максвелла, изменение магнитного поля приводит к появлению вихревого электрического поля:

$$\text{rot}\mathbf{E} = -d\mathbf{B}/dt. \quad (11.3)$$

Выражая индукцию магнитного поля через векторный потенциал  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A} , \quad (11.4)$$

получаем уравнение  $\text{rot} \mathbf{E} = -\text{rot} [d\mathbf{A} / dt]$ , интегрируя которое получаем

$$\mathbf{E} = -d\mathbf{A} / dt + C , \quad (11.5)$$

где константа  $C$  равна нулю, так как  $\mathbf{E} = 0$ , если  $d\mathbf{A} / dt = 0$ .

Под действием электрического поля с напряженностью (11.5) частица ускоряется, ее кинетический импульс изменяется и через время  $\tau$  становится равным

$$m\mathbf{v}_2 = m\mathbf{v}_1 + \int_0^\tau q\mathbf{E}dt = m\mathbf{v}_1 - q \int_0^\tau \frac{d\mathbf{A}}{dt} dt = m\mathbf{v}_1 - q\mathbf{A} , \quad (11.6)$$

где  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал, соответствующий величине введенного за время  $\tau$  магнитного поля.

Из (11.6) следует, что величина

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A} \quad (11.7)$$

равна значению кинетического импульса до введения магнитного поля  $m\mathbf{v}_1 = m\mathbf{v}_2 + q\mathbf{A}$ , то есть не зависит от  $\mathbf{B}$ . Эта величина (11.7) и называется **каноническим импульсом**.

### 11.1.2. Магнитный поток внутри сверхпроводящей трубки

В 1933 г. Мейснером и Оксенфельдом было открыто удивительное свойство сверхпроводников. При охлаждении массивных сверхпроводников от  $T > T_c$  ( $T_c$  — температура перехода в сверхпроводящее состояние, критическая температура) в постоянном магнитном поле обнаружено, что при температуре  $T_c$  магнитное поле выталкивается из объема образца, а по его поверхности начинает течь сверхпроводящий ток. Поверхностный сверхпроводящий ток течет в слое толщиной  $\gamma$ , которая называется **глубиной проникновения магнитного поля**. Сверхпроводящий ток своим полем полностью экранирует проникновение в образец внешнего магнитного поля, так что внутри сверхпроводника индукция магнитного поля  $\mathbf{B}$  всегда равна нулю. Величина  $\gamma$  варьируется в пределах от 400 до нескольких тысяч ангстрем. Таким образом, формально сверхпроводники в сверхпроводящем состоянии ведут себя как идеальные

диамагнетики с магнитной восприимчивостью  $\chi = -1$  (индукция  $\mathbf{B}$  и напряженность  $\mathbf{H}$  магнитного поля в магнетиках связаны соотношением

$$\mathbf{B} = (1 + \chi)\mu_0 \mathbf{H}.$$

В первом приближении индукция магнитного поля экспоненциально затухает при удалении от поверхности  $x = 0$  вглубь образца ( $x > 0$ ) (см. рис. 11.1).

Для удобства расчетов экспоненциальная функция  $B(x)$  заменяется ступенькой, ширина  $\gamma$  которой удовлетворяет соотношению

$$\int_0^{\infty} B(x) dx = \gamma B(0), \quad (11.8)$$

где  $x$  — координата вдоль нормали к поверхности,  $B(0)$  — магнитная индукция на поверхности сверхпроводника (рис. 11.1). Таким образом, на глубине  $\gamma$  внешнее магнитное поле уменьшается в  $e$  раз.

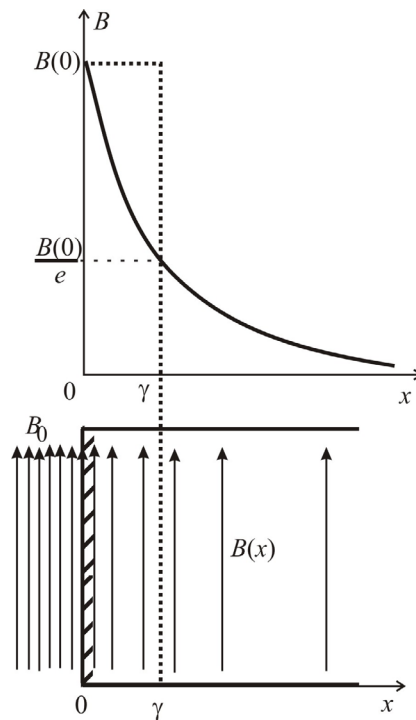


Рис. 11.1. Индукция  $B$  магнитного поля уменьшается от значения  $B(0) = B_0$  на поверхности при  $x = 0$  до нуля при переходе вглубь сверхпроводника  $x \rightarrow \infty$ . На глубине проникновения  $\gamma$  индукция уменьшается в  $e$  раз.

**Задача 11.1.** Длинная сверхпроводящая трубка (внутренний радиус  $R_i$ , внешний радиус  $R_e$ , а толщина стенок значительно больше  $\gamma$ :  $R_e - R_i \gg \gamma$ ) находится при температуре выше  $T_c$  в однородном внешнем магнитном поле, индукция которого параллельна оси трубки (рис. 11.2). Затем температура понижается ниже  $T_c$ . По поверхности трубки, в слое толщиной  $\gamma$  начинает течь круговой незатухающий сверхпроводящий ток, экранирующий материал в объеме трубки от проникновения внешнего магнитного поля. Определите магнитный поток, пронизывающий внутреннюю полость трубки (рис. 11.2).

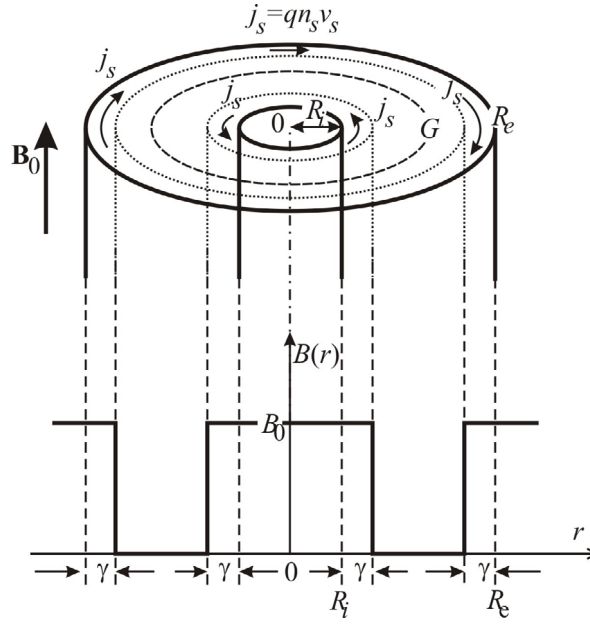


Рис. 11.2. Внешнее магнитное поле экранируется сверхпроводящим током так, что индукция магнитного поля в объеме сверхпроводящей трубки равна нулю. Вблизи поверхности магнитное поле проникает в трубку на глубину  $\gamma$ .

**Решение.** Условие квантования Бора–Зоммерфельда (11.2), определяющее стационарные замкнутые орбиты в магнитном поле, с учетом (11.7) принимает вид

$$\oint m v(r) d\ell + q \oint A(r) d\ell = 2\pi\hbar \cdot n. \quad (11.9)$$

Скорость  $v$  входит в формулу для плотности сверхпроводящего тока

$$j_s = q n_s v_s. \quad (11.10)$$

Подставляя  $v_s$  из (11.10) в (11.9), находим

$$\frac{m}{q n_s} \oint j_s(r) d\ell + q \oint A(r) d\ell = 2\pi\hbar \cdot n. \quad (11.11)$$

Преобразуем второе слагаемое в левой части (11.9):

$$\oint A(r)d\ell = \iint_{\Sigma} \text{rot} A ds = \iint_{\Sigma} B_n ds = \Phi_n, \quad (11.12)$$

т. е. циркуляция векторного потенциала по замкнутому контуру  $\oint A(r)d\ell$  равна магнитному потоку  $\Phi_n = \iint_{\Sigma} B_n ds$  через площадь  $\Sigma$ ,

ограниченную этим контуром.

Условие квантования (11.11) приобретает вид

$$\Phi_n + \frac{m}{q^2 n_s} \oint j_s d\ell = \frac{2\pi\hbar n}{q}, \quad (11.13)$$

где  $q$  – заряд частиц, квантование канонического импульса которых приводит к квантованию магнитного потока в цилиндре. Как следует из эксперимента, этот заряд равен удвоенному заряду электрона  $q = 2e$ .

Выберем контур  $G$  (рис. 11.2) внутри сверхпроводящего материала трубки, где  $\mathbf{B} = 0$  и  $j_s = 0$ . Тогда из (11.13) получаем, что магнитный поток через площадь круга с радиусом  $R_i + \gamma$  (отверстие с радиусом  $R_i$  плюс слой толщиной  $\gamma$ ) квантован:

$$\Phi_n = \frac{\pi\hbar}{e} n, \quad (11.14)$$

где квант магнитного потока

$$\Phi_0 = \frac{\pi\hbar}{e} = \frac{2\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{1,6 \cdot 10^{-19}} = 2,06 \cdot 10^{-15} \text{ Вб}. \quad (11.15)$$

Величина кванта магнитного потока (11.15) мала, и чтобы наблюдать заметные скачки магнитного потока  $\Phi_n = B \cdot \pi R_i^2$  при изменении индукции магнитного поля  $\mathbf{B}$ , следует брать цилиндры с малым внутренним радиусом  $R_i$ .

**Ответ.**  $\Phi_n = \pi\hbar n / e$ .

### §11.2. Квантование движения заряженной частицы в магнитном поле

На заряженные частицы, движущиеся в магнитном поле, действует сила Лоренца. Пусть индукция магнитного поля направлена вдоль оси  $OZ$ . Тогда частицы совершают вращательное движение в плоскости  $XY$ , перпендикулярной направлению индукции магнит-

ного поля. Движение в этой плоскости периодическое и ограниченное. Энергия всякого периодического движения квантуется, и можно ожидать квантования той части кинетической энергии частицы, которая связана с компонентами скорости  $v_x$  и  $v_y$ .

Уравнение Шредингера для частицы в магнитном поле получается заменой оператора  $-i\hbar\nabla$  кинетического импульса  $m\mathbf{v}_1$  в нулевом магнитном поле на оператор  $p$  кинетического импульса  $m\mathbf{v}_2$  (11.6) в магнитном поле:

$$p = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A}, \quad (11.16)$$

$$\frac{(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2}{2m}\psi = E\psi, \quad (11.17)$$

где  $q$  – заряд частицы,  $\mathbf{A}$  – векторный потенциал магнитного поля. Так как  $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}$ , то вектор  $\mathbf{A}$  можно выбрать в виде  $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$ . В этом случае для компонент оператора  $p$  (11.16) справедливы выражения:

$$\begin{aligned} p_x &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - qyB, \\ p_y &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \\ p_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned}$$

Решение уравнения (11.17) можно получить в аналитическом виде (см., например, учебники по квантовой механике), но здесь мы не будем останавливаться на ходе решения. Скажем только, что для движения в плоскости  $XY$  разрешенные энергетические уровни такие же, как для квантового осциллятора (задачи 3.11 и 4.7). Энергетический спектр заряженной частицы в магнитном поле представляется в виде

$$E = E_{x,y} + E_z = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{P_z^2}{2m}, \quad (11.18)$$

где энергия поперечного движения

$$E_{x,y} = E_{\perp} = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (11.19)$$

**Циклотронная частота**  $\omega_c$  — частота прецессионного движения частицы по замкнутой траектории в плоскости, перпендику-

лярной направлению индукции магнитного поля, может быть найдена из классического уравнения движения заряженной частицы в магнитном поле:

$$\frac{mv_{\perp}^2}{r} = qv_{\perp}B, \quad (11.20)$$

где  $m$  – масса,  $q$  – заряд частицы,  $r$  – радиус орбиты,  $v_{\perp} = \omega_c r$ . Из (11.20) находим

$$v_{\perp} = \frac{qB}{m} r. \quad (11.21)$$

Таким образом, все частицы прецессируют с одной и той же частотой

$$\omega_c = \frac{qB}{m}. \quad (11.22)$$

Энергия продольного движения квантуется так же, как и в предыдущих задачах, например из-за ограничения движения вдоль оси  $OZ$ , обусловленного размером  $L$  кристалла:

$$E_{\parallel} = \frac{p_z^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( \frac{2\pi\hbar}{L} n_z \right)^2. \quad (11.23)$$

**Задача 11.2.** Определите радиус орбит электронов в двумерном металлическом кристалле, если магнитное поле с индукцией  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$  направлено перпендикулярно плоскости кристалла.

**Решение.** Магнитное поле не совершает работы, так как сила Лоренца всегда перпендикулярна скорости движения электронов. Поэтому энергия движения в магнитном поле не изменяется

$E_{x,y} = E_{\perp} = \frac{p_{\perp}^2}{2m}$ . Используя (11.18), имеем:

$$\frac{p_{\perp}^2}{2m} = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \text{ и } p_{\perp n} = \sqrt{2m\hbar\omega_c (n + 1/2)}. \quad (11.24)$$

Так как  $p_{\perp n} = m\omega_c r_{\perp n}$ , то

$$r_{\perp n} = \sqrt{\frac{2\hbar(n + 1/2)}{m\omega_c}} = \sqrt{\frac{2\hbar}{|e|\hbar B}} (n + 1/2). \quad (11.25)$$

Из (11.25) следует, что не любые радиусы орбит для электронов разрешены. Переход с одной орбиты на соседнюю с квантовым номером на единицу больше возможен только при получении электроном энергии, равной энергии **циклотронного кванта**  $\hbar\omega_c$ . Все электроны, имеющие одинаковую энергию  $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$ , то есть находящиеся на энергетическом уровне с одним квантовым числом  $n$ , вращаются по орбитам одинакового радиуса.

**Ответ.**  $r_{\perp n} = \sqrt{\frac{2\hbar}{|e|B}}(n + 1/2)$ .

**Задача 11.3.** В рамках условия предыдущей задачи определите, как изменяется плотность электронных состояний при введении магнитного поля. Площадь, занимаемая двумерным кристаллом, равна  $S = L^2$ . Наличие спина и собственного магнитного момента у электронов не учитывать.

**Решение.** В *отсутствие магнитного поля*, с учетом квантования импульса вдоль осей  $OX$  и  $OY$  ( $p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}n_x$  и  $p_y = \frac{2\pi\hbar}{L}n_y$ ),

объем квантового состояния равен  $(2\pi\hbar/L)^2$ . Одну и ту же энергию из интервала значений  $(E, E + dE)$  имеют электронные состояния, находящиеся в импульсном пространстве в кольце с внутренним радиусом  $p = \sqrt{2mE}$  (6.14) и внешним  $p + dp$ , где

$$dp = \sqrt{\frac{m}{2E}}dE \quad (6.15).$$

В заданном интервале энергии  $dE$  число состояний в кольце равно:

$$dN = 2 \frac{2\pi p dp}{(2\pi\hbar/L)^2} = \frac{Sm}{\pi\hbar^2}dE. \quad (11.26)$$

Коэффициент 2 в (11.26) учитывает возможность нахождения в одном состоянии двух электронов с разными направлениями спинов.

Из (11.26) находим плотность состояний:



$$\frac{dN}{dE} = \frac{Sm}{\pi\hbar^2}, \quad (11.27)$$

которая оказывается не зависящей от энергии. Чем больше энергия  $E$ , т. е. чем больше импульс  $p$  и радиус окружности, тем меньше ширина кольца  $dp$  (6.15). При одном и том же  $dE$  число состояний  $dN$  в кольце оказывается одинаковым.

**В магнитном поле** энергия квантована:  $E = \hbar\omega_c (n + 1/2)$  (11.19). Так как электроны имеют одинаковую циклотронную частоту вращения, то энергетический спектр всей системы совпадает с энергетическим спектром одного электрона.

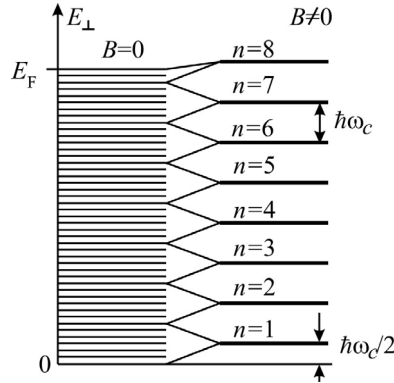


Рис. 11.3. В отсутствие магнитного поля ( $\mathbf{B} = 0$ ) плотность состояний для двумерной пленки постоянна и разрешенные значения энергии образуют систему эквидистантных квазинепрерывных уровней энергии (левая часть рисунка). В магнитном поле полосы квазинепрерывного спектра шириной  $\hbar\omega_c$  стягиваются в дискретные энергетические уровни Ландау.

В отсутствие магнитного поля уровни энергии расположены с постоянной плотностью (11.27). В магнитном поле эти уровни стягиваются в уровни, отстоящие друг от друга на  $\hbar\omega_c$  (см. рис. 11.3). Эти уровни называются **уровнями Ландау**. Каждый уровень Ландау в магнитном поле объединяет все уровни квазинепрерывного спектра в интервале энергии  $\hbar\omega_c$ , поэтому степень его вырождения равна

$$N_{n,B} = \hbar\omega_c \cdot \frac{dN}{dE} = \hbar\omega_c \frac{Sm}{\pi\hbar^2} = S \frac{eB}{\pi\hbar}.$$

Вырождение энергетических уровней Ландау в магнитном поле возрастает с ростом индукции магнитного поля.

Таким образом, плотность состояний в магнитном поле описывается набором дельта-функций, расположенных на одинаковом энергетическом расстоянии  $\hbar\omega_c$  друг от друга.

**Примечание.** Учтем теперь, что каждый электрон имеет собственный механический момент  $s$  (спин) и связанный с ним магнитный момент  $\mu_s$ . Магнитный момент свободного электрона равен магнетону Бора:

$$\mu_B = s \frac{e\hbar}{m_0} = \frac{e\hbar}{2m_0}.$$

Энергия магнитного момента в магнитном поле  $-(\mu_s \mathbf{B})$  зависит от ориентации магнитного момента, то есть от направления спина. Каждый уровень Ландау расщепляется на два подуровня, один из которых соответствует направлению магнитного момента вдоль магнитной индукции поля (уровень с меньшей энергией), другой – противоположному направлению (уровень с большей энергией). Энергетическое расстояние между подуровнями равно  $2(\mu_s B)$ . Для свободного электрона это расстояние  $2(\mu_B B) = (e\hbar/m_0)B$  совпадает с расстоянием между уровнями Ландау.

В реальных веществах (металлах, полупроводниках) значения масс электрона  $m_c$  и  $m_s$ , определяющих величину расщепления Ландау  $\hbar\omega_c = (e\hbar/m_c)B$  и величину спинового расщепления уровней  $2(\mu_s B) = (e\hbar/m_s)B$ , могут значительно отличаться от массы  $m_0$  свободного электрона. А для полупроводников циклотронная масса отличается и по знаку: для электронов  $m_c > 0$ , для дырок  $m_c < 0$ .

Таким образом, для энергии электронов в магнитном поле можно записать (используя (11.18))

$$E = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) - (\mu_s \mathbf{B}) + \frac{P_z^2}{2m_z} = \frac{e\hbar B}{m_c} \left( n + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{e\hbar B}{2m_s} + \frac{P_z^2}{2m_z}. \quad (11.28)$$

Дно зоны проводимости  $E_c$  в магнитном поле определяется положением нижнего энергетического уровня  $n = 0^-$ , соответствующего направлению магнитного момента электрона вдоль  $\mathbf{B}$ :

$$E_c = \hbar\omega_{cc} / 2 - \mu_{sc} B.$$

Энергия дырок отсчитывается от потолка валентной зоны вниз. Потолок валентной зоны  $0^-$  соответствует минимальной энергии — уровню Ландау с номером  $n = 0$  и магнитным моментом, направленным вдоль индукции магнитного поля:

$$E_v = \hbar\omega_{cy}/2 - \mu_{sv}B.$$

**Ответ.**  $\frac{dN}{dE} = \frac{Sm}{\pi\hbar^2}, \quad N_{n,B} = S \frac{eB}{\pi\hbar}.$

**Задача 11.4.** Оцените, с какой частотой изменяется плотность состояний на уровне Ферми у двумерного металла при увеличении индукции магнитного поля. Считать, что магнитное поле невелико, так что, во-первых, под уровнем Ферми насчитывается большое количество уровней Ландау (ситуация далека от квантового предела, при котором  $\hbar\omega_c/2 = E_F$ ) и, во-вторых, положение уровня Ферми не изменяется при изменении индукции магнитного поля. Определите период осцилляций электронной плотности на уровне Ферми.

**Решение.** При увеличении магнитного поля расстояние между уровнями Ландау увеличивается, и все уровни поднимаются вверх по энергии. Если верхний заполненный электронами уровень расположен ниже уровня Ферми на расстоянии  $\hbar\omega_c/2$ , его степень заполнения такая же, как и всех уровней Ландау, расположенных ниже по энергии. При дальнейшем увеличении магнитного поля заселенность верхнего уровня уменьшается (см. рис. 11.3) и обращается в нуль, когда он поднимается выше уровня Ферми на расстояние  $\hbar\omega_c/2$ . Расположенный ниже уровень Ландау в этот момент полностью заполнен. Таким образом, заселенность верхнего уровня при увеличении магнитного поля периодически изменяется от максимального значения до нуля.

Поскольку число уровней Ландау велико, то можно пренебречь  $1/2$  в (11.19). Запишем условие совпадения уровня Ферми  $E_F$  и уровня Ландау с номером  $n_1$  в магнитном поле с индукцией  $B_1$  в виде  $E_F = \hbar\omega_{c1}n_1$ , или, используя выражение для циклотронной частоты,

$$E_F = \frac{\hbar q}{m} B_1 n_1. \quad (11.29)$$

Последующее совпадение уровня Ферми с уровнем Ландау с номером  $n_2 = n_1 - 1$  произойдет в магнитном поле  $B_2$ :

$$E_F = \frac{\hbar q}{m} B_2 (n_1 - 1). \quad (11.30)$$

Сравнивая уравнения (11.29) и (11.30), находим  $B_2(n_1 - 1) = B_1 n_1$ . Выражая из (11.29)  $n_1$ , получаем

$$\frac{1}{B_1} - \frac{1}{B_2} = \frac{\hbar q}{mE_F}.$$

Таким образом, в магнитном поле заселенность верхнего уровня в зависимости от  $(1/B)$  меняется с постоянным периодом  $T_{1/B}$ :

$$T_{1/B} = \frac{\hbar q}{mE_F}. \quad (11.31)$$

Определяя экспериментально период осцилляций заселенности (11.31), можно вычислить энергию Ферми.

**Ответ.**  $T_{1/B} = \frac{\hbar q}{mE_F}.$

**Задача 11.5.** В двумерном металле в магнитном поле электроны совершают вращательное движение по квантовым орбитам, каждая из которых соответствует определенному уровню Ландау. Вычислите, на сколько отличаются магнитные потоки через орбиты, квантовые номера которых отличаются на единицу.

**Решение.** Радиус орбиты с квантовым номером  $n$  для электрона  $r_n = \sqrt{\frac{2\hbar}{|e|B} \left( n + \frac{1}{2} \right)}$ , магнитный поток через площадь круговой орбиты  $\Phi_n = B \cdot \pi r_n^2 = \frac{2\pi\hbar}{|e|} \left( n + \frac{1}{2} \right).$

Магнитный поток через соседние орбиты отличается на удвоенный квант магнитного потока:

$$\Delta\Phi = \Phi_{n+1} - \Phi_n = \frac{2\pi\hbar}{|e|} = 2\Phi_0 = 4,12 \cdot 10^{-15} \text{ Вб}.$$

**Ответ.**  $\Delta\Phi = 2\pi\hbar/|e| = 2\Phi_0.$

### §11.3. Квантовый размерный эффект

Квантовый размерный эффект представляет собой еще одно проявление квантовых свойств частиц на макроскопическом уровне.

Как только размеры кристалла или толщина кристаллической пленки становятся сравнимыми с длиной волны де-Бройля части-

цы, включается механизм квантования энергии в узких потенциальных ямах. Возникает ряд качественно новых эффектов, называемых квантовыми размерными эффектами.

**Задача 11.6.** Полупроводниковая пленка из InSb имеет толщину  $L = 10$  нм. Плоскость пленки перпендикулярна направлению оси  $OZ$ . У массивного полупроводника InSb имеется прямая энергетическая щель между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости, равная  $E_g = 0,18$  эВ. Определить сдвиг края полосы поглощения в пленке по отношению к положению края для массивных образцов из InSb. В качестве модели потенциала вдоль оси  $OZ$  для пленки используйте прямоугольный потенциальный «желоб с плоским дном» и бесконечно высокими стенками. Эффективные массы электронов у дна зоны проводимости и дырок у потолка валентной зоны равны соответственно  $m_{3C} = 0,013m_0$  и  $m_{3V} = 0,4m_0$ .

**Решение.** Потенциальная энергия электронов в пленке

$$U(z) = \begin{cases} \infty, & \text{при } z < 0, \\ 0, & \text{при } 0 \leq z \leq L, \\ \infty, & \text{при } z > L. \end{cases} \quad (11.32)$$

Кинетическая энергия вдоль оси  $OZ$  квантуется (см. задачу 3.4):

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_z L^2} n^2. \quad (11.33)$$

Пусть в направлениях  $OX$  и  $OY$  эффективные массы одинаковы и равны  $m_x = m_y = m_1$ , тогда для полной энергии можно записать

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_1} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_3 L^2} n^2, \quad (11.34)$$

где  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ .

Квазидискретный спектр электронов (11.34) в зоне проводимости для размерно-квантованной полупроводниковой пленки изображен на рис. 11.4.

Дну зоны проводимости ( $k_x = k_y = k_z = 0$ ) в массивном полупроводнике соответствует энергия  $E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_3}$ , равная нулю, если энергия отсчитывается от дна зоны проводимости (рис. 11.4).

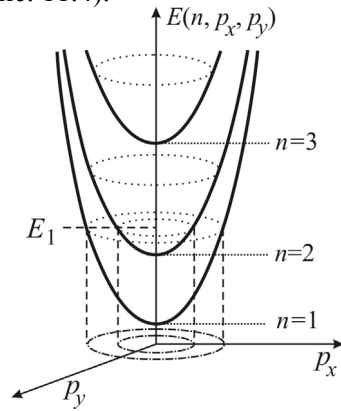


Рис. 11.4. Зависимости кинетической энергии электрона, находящегося в зоне проводимости в полупроводниковой пленке, от компонент импульса  $p_x$ ,  $p_y$  при разных значениях квантовых чисел  $n$ . Энергии  $E_1$  соответствуют состояния с квантовыми номерами  $n = 1$  и  $n = 2$  и импульсами, отмеченными на рисунке штрихпунктирными линиями. С ростом энергии число состояний с заданной энергией растет, то есть растет плотность состояний. Точке  $p_x = 0$ ,  $p_y = 0$  соответствует энергия дна зоны проводимости в массивном полупроводнике.

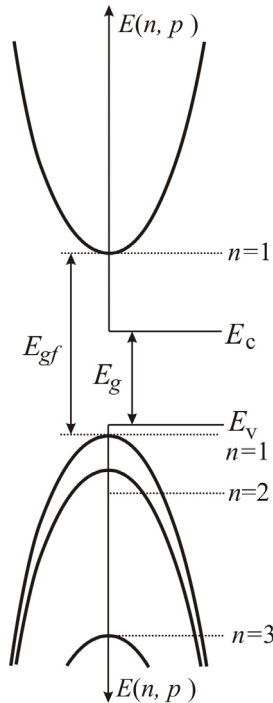


Рис. 11.5. Зависимости энергии от импульса для разных квантовых чисел  $n$  у электронов в зоне проводимости и валентной зоне. Для массивного полупроводника  $E_c$  – дно зоны проводимости,  $E_v$  – потолок валентной зоны,  $E_g$  – энергетическая щель. Для пленки энергетическая щель  $E_{gf}$ .

В пленке дно зоны проводимости соответствуют  $k_x = k_y = 0$  и  $n = 1$ , и таким образом, энергия

$$\Delta E_c = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{3c}L^2},$$

где  $m_{3c}$  – эффективная масса электронов у дна зоны проводимости.

Таким образом, дно зоны проводимости в пленке сдвинуто вверх на величину

$$\Delta E_c = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{3c}L^2} = \frac{10^{-68} \pi^2}{2 \cdot 0,013 \cdot 10^{-30} 10^{-16}} \approx 3,8 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} = 0,24 \text{ эВ}.$$

Отсчитывая энергию дырок вниз от потолка валентной зоны  $E_v$  в массивном полупроводнике (рис. 11.5), получаем, что в пленке потолок валентной зоны сдвинут вниз по энергии на величину

$$\Delta E_v = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{3v}L^2} = \frac{10^{-68} \pi^2}{2 \cdot 0,4 \cdot 10^{-30} 10^{-16}} \approx 0,12 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} = 0,0077 \text{ эВ}.$$

Если в массивном полупроводнике энергетическая щель между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости равна  $E_g = E_c - E_v$ , то для пленки ширина энергетической щели отличается на величину

$$\Delta E_{gf} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{3c}L^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{3v}L^2} \approx 3,92 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} \approx 0,25 \text{ эВ}$$

и равна

$$E_{gf} = E_g + \Delta E_{gf} = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{3c}L^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{3v}L^2} \approx 0,18 + 0,25 = 0,43 \text{ эВ}$$

(рис. 11.5).

Поглощение электромагнитных волн в массивном полупроводнике начинается с частот

$$\omega = \frac{1}{\hbar} E_g = \frac{0,18 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{10^{-34}} = 2,9 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1},$$

соответствующих длинам волн

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{2\pi c \hbar}{E_g} = 6,5 \cdot 10^{-6} \text{ м} = 6500 \text{ нм}.$$

В пленке край полосы поглощения сдвинут в коротковолновую область:

$$\omega_f = \frac{1}{\hbar} E_{gf} = \frac{0,42 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{10^{-34}} = 6,8 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1},$$

$$\lambda_f = \frac{2\pi c}{\omega_f} = 2770 \text{ нм}.$$

**Ответ.**  $\Delta\omega = \omega_f - \omega = \frac{\Delta E_{gf}}{\hbar} = \frac{\hbar\pi^2}{2L^2} \left[ \frac{1}{m_{3c}} + \frac{1}{m_{3v}} \right] \approx 3,9 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1},$

$$\lambda_f - \lambda = 2770 - 6500 = -3730 \text{ нм}.$$

**Задача 11.7.** Квадратная пленка изготовлена из полупроводника InSb. Длина стороны пленки  $L_1$ , толщина  $L$ . В качестве модели потенциала вдоль оси  $OZ$ , перпендикулярной плоскости пленки, используйте прямоугольный потенциальный «желоб с плоским дном» и бесконечно высокими стенками. Определите зависимость плотности электронных состояний от энергии в размерно-квантованной полупроводниковой пленке. Электронный газ считать вырожденным, то есть подчиняющимся статистике Ферми–Дирака. Эффективные массы вдоль осей  $OX$  и  $OY$  одинаковы:  $m_x = m_y = m_1$ , вдоль оси  $OZ$  эффективная масса равна  $m_3$ .

**Решение.** В массивном проводнике объем квантового состояния в импульсном пространстве равен  $(2\pi\hbar/L)^3$ , где  $L^3$  – объем кристалла (см. задачу 6.3). Свободно перемещающиеся вырожденные электроны занимают в импульсном пространстве квантовые состояния внутри объема, ограниченного поверхностью Ферми. В частности в изотропном веществе поверхность Ферми может быть сферической.

В пленке квантование импульса в направлениях  $p_x, p_y$  происходит так же, как и в массивном образце. Квант импульса равен  $2\pi\hbar/L_1$ .

В рамках предложенной модели потенциала в направлении  $OZ$ , квант импульса равен  $\pi\hbar/L$  (см. совместно (4.60) и (4.63)). Поскольку  $L_1 \gg L$ , то квант импульса вдоль оси  $z$  значительно превосходит кванты импульса в поперечных направлениях —  $\pi\hbar/L \gg 2\pi\hbar/L_1$ . В этом случае квантовое состояние представляет собой не кубик объемом  $(2\pi\hbar/L)^3$ , как в массивном проводнике, а вытянутый прямоугольный параллелепипед с квадратным основа-



нием в плоскости  $p_x, p_y$ . Увеличение размера квантового состояния в размерно-квантованной пленке вдоль оси  $p_z$  означает, что из всех квантовых состояний в объеме сферы Ферми для массивного проводника электроны могут занимать только состояния с импульсами  $p_{zn} = \frac{\pi\hbar}{L}n$ , т. е. состояния в эллипсах, получающихся при пересечении поверхности Ферми и плоскостей  $p_{zn} = \frac{\pi\hbar}{L}n$  (см. рис. 11.6).

Используя результаты задачи ((4.62), (4.65)), для кинетической энергии движения вдоль оси  $OZ$  имеем

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_z L^2} n^2,$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$  – квантовое число

Поскольку  $\pi\hbar/L \gg 2\pi\hbar/L_1$ , то при записи кинетической энергии можно не учитывать дискретность состояний в плоскости  $p_x - p_y$ , считая спектр в этой плоскости квазинепрерывным.

Тогда для полной энергии можно записать

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + E_n = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_z L^2} n^2, \quad (11.35)$$

где  $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$ .

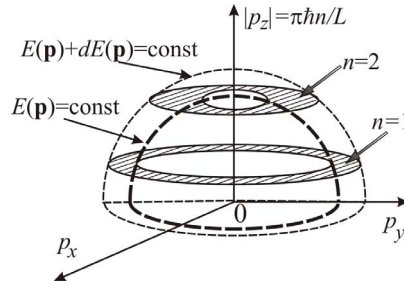


Рис. 11.6. Для вычисления плотности состояний в подзоне (при  $n=\text{const}$ ) изображены половины изоэнергетических сферических поверхностей  $E(\mathbf{p}) = \text{const}$  и  $E(\mathbf{p}) + dE(\mathbf{p}) = \text{const}$ . Состояния в подзонах в заданном интервале энергии  $dE(\mathbf{p})$  заштрихованы.

Площадь кольца, заключенного между двумя изоэнергетическими поверхностями  $E(\mathbf{p}) = \text{const}$  и  $E(\mathbf{p}) + dE(\mathbf{p}) = \text{const}$ :

$$dS_k = \pi(p_{\perp} + dp_{\perp})^2 - \pi p_{\perp}^2 = 2\pi p_{\perp} dp_{\perp},$$

где  $p_{\perp}$  – импульс в поперечном к оси  $z$  направлении.

С учетом вырождения по спину, число квантовых состояний в данном кольце равно:

$$dN = 2 \frac{dS_k}{(2\pi\hbar/L_1)^2} = 2 \frac{2\pi p_{\perp} dp_{\perp}}{(2\pi\hbar/L_1)^2} = \frac{dp_{\perp}^2}{2\pi\hbar^2} L_1^2. \quad (11.36)$$

Из закона дисперсии (11.35) имеем

$$p_{\perp}^2 = 2m_1[E(p) - E_n]. \quad (11.37)$$

Для фиксированной подзоны (то есть зоны с заданным номером  $n$ ), дифференцируя (11.37), находим

$$dp_{\perp}^2 = 2m_1 dE(p).$$

Теперь число квантовых состояний (11.36) в подзоне можно переписать в виде

$$dN = \frac{dp^2}{2\pi\hbar^2} L_1^2 = \frac{m_1 dE}{\pi\hbar^2} L_1^2.$$

Из полученного соотношения находим плотность состояний в одной подзоне:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{m_1}{\pi\hbar^2} L_1^2.$$

Для одной подзоны плотность состояний в единице объема ( $L_1^2 L = 1$ )

$$\rho_1 = \frac{dn}{dE} = \frac{m_1}{L\pi\hbar^2}. \quad (11.38)$$

Заметим, что в этом случае плотность состояний не зависит от энергии и номера подзоны.

Для массивного проводника плотность состояний при  $m_1 = m_3$  была получена в гл.6 (6.26):

$$\rho(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{E}. \quad (11.39)$$

Проанализируем зависимость плотности состояний от энергии для двумерной пленки.

Пусть в импульсном пространстве подзона с номером  $n$  касается сферы, соответствующей  $E_c = \text{const}$ . Тогда состояния с энергией  $E < E_c$  находятся в  $(n-1)$  подзонах с меньшими квантовыми номерами. Поскольку плотность состояний одинакова во всех подзонах, то суммарная для всех подзон плотность состояний равна

$$\rho = \rho_1(n-1) = \frac{m_1}{L\pi\hbar^2}(n-1).$$

Касание дна подзоны с номером  $n$  и сферы  $E_c = \text{const}$  соответствует энергии (11.35) при условии  $p_x = p_y = 0$ , то есть

$$E_c = E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_3L^2}n^2. \quad (11.40)$$

При этом значении энергии плотность состояний испытывает скачок, равный вкладу  $\rho_1$   $n$ -й подзоны, и становится равной  $\rho = \rho_1 n$ . Выражая из (11.40)  $n$  через энергию  $E_n$ , находим значение, которое принимает плотность состояний при подключении  $n$ -й подзоны:

$$\rho(E_n) = \rho_1 \cdot n = \frac{m_1}{L\pi\hbar^2} \cdot \frac{L}{\pi\hbar} \sqrt{2m_3E_n} = \frac{m_1}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{2m_3E_n}. \quad (11.41)$$

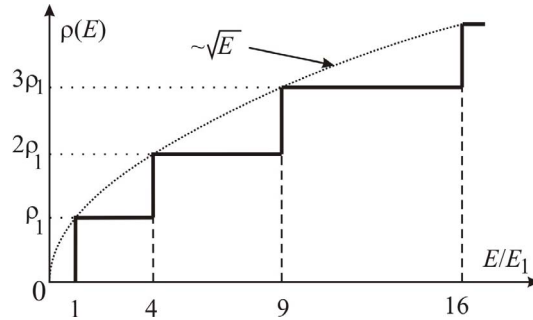


Рис. 12.7. Зависимость плотности состояний от энергии для двумерной пленки

Выражение (11.41) совпадает с плотностью состояний (11.39) в трехмерном случае при  $m_1 = m_3$ .

Таким образом, с ростом энергии плотность состояний испытывает скачкообразные изменения, как только энергия совпадает с дном очередной подзоны, то есть при значениях  $E = E_n$  (рис. 11.7). В этих точках плотность состояний в пленке совпадает со значением плотности электронных состояний в массивном образце (пунктирная линия на рис. 11.7). Отсутствие состояний при  $E < E_1$  связано с принципом неопределенности.

**Примечания.** 1. Впервые эффекты размерного квантования наблюдались в пленках полупроводника InSb и полуметалла Bi.

2. В настоящее время на основе полупроводниковых пленок изготавливаются квантовые структуры с потенциальными барьерами различной формы, в том числе и рассмотренные в главах 4 и 5.

Если привести в контакт два полупроводника (рис. 11.8 а) с различными запрещенными зонами (широкозонный и узкозонный), то для электронов, движущихся в зоне проводимости узкозонного полупроводника с энергией меньше  $E_{c2}$ , граница с широкозонным полупроводником играет роль потенциального барьера (см. задачу 4.2).

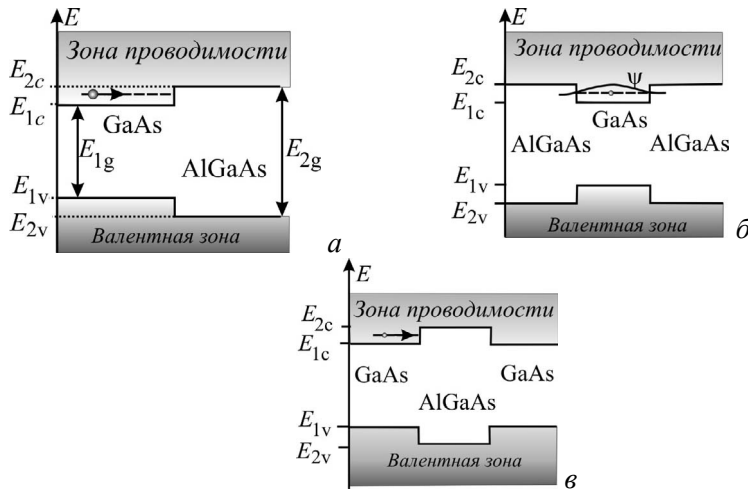


Рис. 11.8. Энергетические схемы **гетероструктур** — контактов полупроводников арсенида галлия GaAs (ширина запрещенной зоны  $E_{1g} = 1,5 \text{ эВ}$ ) и твердого раствора  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , в котором часть  $x$  атомов галлия замещена атомами алюминия (ширина запрещенной зоны  $1,5 \text{ эВ} \leq E_{2g} \leq 2,2 \text{ эВ}$ ).

Если же тонкий слой полупроводника с узкой запрещенной зоной поместить между широкозонными полупроводниками, то получится одномерная квантовая яма (см. задачу 4.5) конечной глубины. На рис. 11.8 б изображен один дискретный уровень (штриховая линия) в яме и волновая функция электрона в этом состоянии.

Структура, содержащая прямоугольный одномерный барьер (задача 4.3), получается, если тонкий слой широкозонного полупроводника расположен между двумя узкозонными полупроводниками (рис. 11.8 в).

Одним из технических методов получения таких структур является метод **молекулярно-лучевой эпитаксии**, который позволяет получать гладкие и резкие (с точностью до моноатомного слоя) границы между соседними слоями.

**Ответ.** См. рис. 11.7, где  $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_3 L^2}$  – энергия дна первой

подзоны,  $\rho_1 = m_1 / (L\pi\hbar^2)$  – плотность состояний в одной подзоне; пунктирная кривая описывается аналитической зависимостью

$$\rho(E) = \frac{m_1}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m_3 E}.$$

### Задачи для самостоятельного решения

**Задача D11.1.** Сверхпроводник занимает полупространство  $x > 0$  (рис. 11.1) и находится в магнитном поле. Используя уравнения Максвелла и II закон Ньютона для сверхпроводящих электронов, найти глубину  $\gamma$  проникновения индукции магнитного поля внутрь сверхпроводника. Оценить глубину проникновения  $\gamma$  для олова, полагая, что концентрация сверхпроводящих электронов равна  $n = 10^{22} \text{ см}^{-3}$ , а масса сверхпроводящих электронов равна массе свободных электронов.

**Ответ.** Решая систему уравнений:

$$\begin{cases} \text{rot} \mathbf{E} = -d\mathbf{B}/dt, \\ \text{rot} \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}, \\ \text{div} \mathbf{B} = 0, \\ m d\mathbf{v}/dt = e\mathbf{E}, \\ \mathbf{j} = env \end{cases}$$

относительно  $\frac{d\mathbf{B}}{dt}$ , получаем уравнение  $\nabla^2 \frac{d\mathbf{B}}{dt} = \left[ \frac{\mu_0 e^2 n}{m} \right] \frac{d\mathbf{B}}{dt}$ .

В одномерном случае решение этого уравнения:

$$\frac{dB(x)}{dx} = \frac{dB}{dx} \Big|_{x=0} \exp \left[ -\frac{x}{\gamma} \right],$$

где  $\gamma = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 e^2 n}}$  — глубина проникновения магнитного поля.

$$\text{Для олова } \gamma = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 e^2 n}} = \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-19}} \sqrt{\frac{0,9 \cdot 10^{-30}}{4\pi 10^{-7} 10^{28}}} \approx 530 \text{ \AA}.$$

Экспериментальное значение лондоновской глубины проникновения для олова  $\gamma = 510 \text{ \AA}$  (для сравнения напомним, что длина волны зеленого света  $5000 \text{ \AA}$ ).

**Задача D11.2.** На рис. 11.9 представлена зависимость сопротивления  $R$  двумерной пленки от индукции магнитного поля  $B$ . Оцените энергию Ферми в пленке, если эффективная масса электронов равна  $m = 0,01m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона.

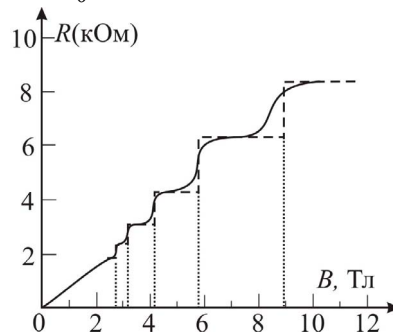


Рис. 11.9. Зависимость сопротивления  $R$  двумерной пленки от индукции магнитного поля  $B$ .

**Ответ.** Период осцилляций в обратном магнитном поле  $T_{1/B} \approx 0,06 \text{ Тл}^{-1}$ ,  $E_F = \frac{\hbar q}{0,01m_0 T_{1/B}} \approx 170 \text{ мэВ}$ .

**Задача D11.3.** Изобразите схематически энергетический спектр дырок в магнитном поле для однозонного дырочного полупроводника при  $m_s > m_c$ .

**Ответ.** При  $m_s > m_c$  орбитальное расщепление  $\hbar\omega_c = e\hbar B/m_c$  превосходит спиновое  $e\hbar B/m_s$  (рис. 11.10).

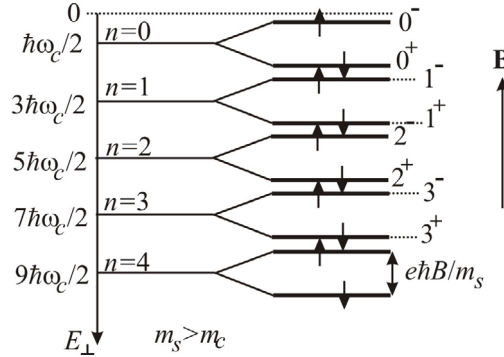


Рис.11.10. Энергетические уровни двумерной пленки в магнитном поле.

**Задача D11.4.** Найдите энергии дна зоны проводимости и потолка валентной зоны в магнитном поле. Энергия в зоне проводимости отсчитывается вверх от положения дна зоны при  $B = 0$ . Энергия в валентной зоне отсчитывается вниз от положения потолка зоны при  $B = 0$ . Как изменяется величина запрещенной щели с ростом индукции магнитного поля, если спиновые массы больше циклотронных, как в зоне проводимости, так и в валентной зоне:  $m_{cs} > m_{cc}$  и  $m_{vs} > m_{vc}$ ?

**Ответ.** Положения дна зоны проводимости  $E_c$  и потолка валентной зоны  $E_v$  определяются положением уровней  $0^-$ :

$$E_c = \frac{e\hbar B}{2m_{cc}} - \frac{e\hbar B}{2m_{cs}} = \frac{e\hbar B}{2} \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right),$$

$$E_v = \frac{e\hbar B}{2m_{vc}} - \frac{e\hbar B}{2m_{vs}} = \frac{e\hbar B}{2} \left( \frac{1}{m_{vc}} - \frac{1}{m_{vs}} \right),$$

$$E_g = E_{g0} + \frac{e\hbar B}{2} \left[ \left( \frac{1}{m_{vc}} - \frac{1}{m_{vs}} \right) + \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right) \right];$$

с ростом  $B$  энергетическая щель увеличивается.

**Задача D11.5.** В металлическом веществе величина перекрытия валентной зоны и зоны проводимости равна  $E_{n0}$  (рис. 11.11). При каких условиях с ростом индукции магнитного поля произойдет фазовый переход металл  $\rightarrow$  диэлектрик (полупроводник)?

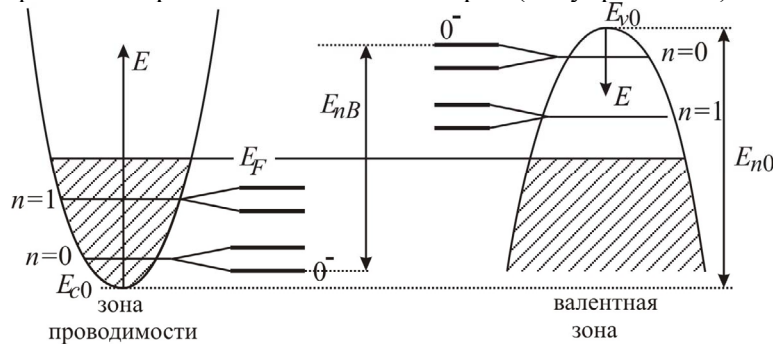


Рис. 11.11. Валентная зона и зона проводимости металлического вещества.

**Ответ.** Для перехода металл  $\rightarrow$  диэлектрик нужно, чтобы с ростом индукции магнитного поля уменьшалось перекрытие зоны проводимости и валентной зоны (расстояние между  $0^-$  уровнями в зонах).

Величина перекрытия в магнитном поле

$$E_{nB} = E_{n0} - \frac{e\hbar B}{2} \left[ \left( \frac{1}{m_{vc}} - \frac{1}{m_{vs}} \right) + \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right) \right]$$

зависит от соотношения спиновых и орбитальных масс. При

$$\left[ \left( \frac{1}{m_{vc}} - \frac{1}{m_{vs}} \right) + \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right) \right] > 0$$

с ростом магнитного поля перекрытие будет уменьшаться. При этом зона проводимости поднимается вверх относительно валентной зоны. Движение зон вызывает перетекание электронов из зоны проводимости в валентную зону.

При критическом значении индукции магнитного поля

$$B_{cr} = \frac{2E_{n0}}{e\hbar} \left[ \left( \frac{1}{m_{vc}} - \frac{1}{m_{vs}} \right) + \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right) \right]^{-1}$$

перекрытие исчезает.

При дальнейшем возрастании магнитного поля дно  $0^-$  для электронов оказывается выше по энергии, чем потолок  $0^-$  для ды-



рок. В энергетическом спектре возникает интервал запрещенных энергий — энергетическая щель  $E_g$ . Таким образом, происходит переход из металлического состояния в диэлектрическое (полупроводниковое). Впервые переход диэлектрик  $\leftrightarrow$  металл был предсказан и открыт на физическом факультете МГУ в 1965 г.

**Задача D11.6.** На рис. 11.12 представлена энергетическая диаграмма сплава  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , где  $x \approx 0,1$ . Энергетическая щель между экстремумами в точке L составляет  $E_g = 15$  мэВ. Потолок дырочного экстремума в точке T находится ниже по энергии, чем потолок электронного экстремума  $L_2$ , на  $\Delta E_{LT} = 12$  мэВ. Эффективные циклотронная и спиновые массы для электронов в экстремумах L:  $m_{cc} = 0,065 m_0$  и  $m_{cs} = 0,11 m_0$ ; для дырок в экстремуме T:  $m_{vc} = 0,064 m_0$  и  $m_{vs} = 0,033 m_0$ . Как будут двигаться экстремумы в точках L и T в магнитном поле? Оценить: 1) при каком значении магнитного поля  $B_{к1}$  дырки экстремума T начинают давать вклад в электропроводность сплава; 2) при каком  $B_{к2}$  электропроводность резко возрастает за счет электронов в  $L_1$ .

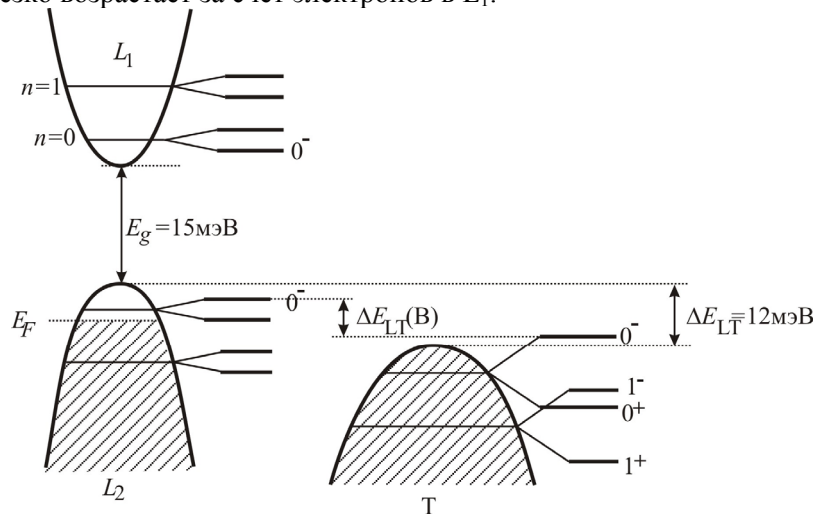


Рис. 11.12. Энергетическая диаграмма сплава  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ .

**Ответ.** Так как для электронов в L спиновая масса больше циклотронной, то спиновое расщепление меньше циклотронного, и с ростом магнитного поля потолок  $0^-$  в L сдвигается по энергии

вниз. А поскольку для дырок в Т ситуация обратная (спиновое расщепление больше орбитального), то с ростом магнитного поля потолок  $0^-$  в Т смещается по энергии вверх.

При оценке индукции магнитного поля  $B_{k1}$  будем считать, что потолок в экстремуме Т достигнет потолка в  $L_2$ . При этом  $\Delta E_{LT}(B_{k1}) = 0$ .

Энергетическое расстояние между потолком зоны  $L_2$  и потолком Т в магнитном поле с индукцией  $B$  равно

$$\Delta E_{LT}(B) = \Delta E_{LT} - \frac{e\hbar B}{2} \left[ \left( \frac{1}{m_{vs}} - \frac{1}{m_{vc}} \right) + \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right) \right].$$

Отсюда получаем значение критического поля  $B_{k1}$ :

$$\begin{aligned} B_{k1} &= \frac{2\Delta E_{LT}}{e\hbar} \left[ \left( \frac{1}{m_{vs}} - \frac{1}{m_{vc}} \right) + \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right) \right]^{-1} = \\ &= \frac{2 \cdot 12 \cdot 10^{-3} e 0,9 \cdot 10^{-30}}{e 10^{-34}} \left[ \left( \frac{1}{0,033} - \frac{1}{0,064} \right) + \left( \frac{1}{0,065} - \frac{1}{0,11} \right) \right]^{-1} \approx 10,3 \text{ Тл}. \end{aligned}$$

В поле  $B_{k2}$  потолок зоны в Т достигнет потолка в точке  $L_1$ :

$$\begin{aligned} B_{k2} &= \frac{2(E_g + \Delta E_{LT})}{e\hbar} \left[ \left( \frac{1}{m_{vs}} - \frac{1}{m_{vc}} \right) - \left( \frac{1}{m_{cc}} - \frac{1}{m_{cs}} \right) \right]^{-1} = \\ &= \frac{2 \cdot 27 \cdot 10^{-3} e 0,9 \cdot 10^{-30}}{e 10^{-34}} \left[ \left( \frac{1}{0,033} - \frac{1}{0,064} \right) - \left( \frac{1}{0,065} - \frac{1}{0,11} \right) \right]^{-1} \approx 58 \text{ Тл}. \end{aligned}$$

## ЛИТЕРАТУРА

### Учебники

#### *Квантовая физика*

1. Вихман Э. Квантовая физика. (Берклевский курс физики). – М.: Наука, 1986, 392 с.
2. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. – М.: Наука, 1969.
3. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. – М.: Физматлит, 1960, 434 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Физматгиз, 1963, 704 с.
5. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Высшая школа, 1961, 512 с.
6. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика. – М.: Наука, 1976, 334 с.
7. Фейнман Р. Фейнмановские лекции по физике. Т. 8, 9. Квантовая механика. – М.: Мир, 1978, 530 с.

#### *Атомная физика*

1. Сивухин Д.В. Курс общей физики, т. 5. Атомная и ядерная физика. – М.: Физматлит, МФТИ, 2002.
2. Савельев И. В. Курс общей физики, т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – СПб.: Лань, 2008, 320 с.
3. Матвеев А.Н. Атомная физика. – М.: Высшая школа, 1989, 439 с.
4. Шпольский Э.В. Атомная физика, т. 1, 2. – М.: Наука, 1974.
5. Борн М. Атомная физика, - М.: Мир, 1967, 493 с.
6. Попов А.М., Тихонова О.В. Лекции по атомной физике. – М.: 2007, 250 с

#### *Дополнительная литература*

1. Фриш С.Э. Оптические спектры атомов. – Москва – Ленинград.: Изд-во физ-мат литературы, 1963, 639 с.
2. Брандт Н.Б., Чудинов С.М. Электронная структура металлов. – М.: Изд-во Московского университета, 1973, 332 с.
3. Матвеев А.Н. Оптика. – М.: Высшая школа, 1985, 351 с.
4. Горелик Г.С. Колебания и волны. Изд-во технико-теорет. Лит. – М - Ленинград. 1950, 551 с.

5. *Миронова Г.А.* Конденсированное состояние вещества: от структурных единиц до живой материи. Т.1. М.: Физический факультет МГУ, 532с., 2004.

6. *Миронова Г.А.* Конденсированное состояние вещества: от структурных единиц до живой материи. Т.2. – М.: Физический факультет МГУ, 840с., 2006.

7. *Миронова Г.А.* Зонная структура электронного энергетического спектра в твердых телах (Модели свободных и сильно связанных электронов). – М.: Изд-во физический факультет МГУ, препринт №5/2001.

#### **Сборники задач и учебные пособия**

1. *Иродов И.Е.* Задачи по общей физике. Москва – Санкт-Петербург, Физматлит, 432с, 2001.

2. *Иродов И.Е., Савельев И.В., Замша О.И.* Сборник задач по общей физике. М.: Наука, 320с., 1975.

3. *Иродов И.Е.* Задачи по квантовой физике. – М.: Высшая школа, 1991, 175 с.

4. *Волькенштейн В.С.* Сборник задач по общему курсу физики. – М.: Наука 1985, 384 с.

5. *Овчинкин В.А., Раевский А.О., Ципенюк Ю.М.* Сборник задач по общему курсу физики. Ч. 3. Атомная и ядерная физика. Строение вещества. – М.: Изд-во МФТИ, 432с, 2001.

6. *Гинзбург В.Л., Левин Л.М., Рабинович М.С., Сивухин Д.В., Четверикова Е.С.* Сборник задач по общему курсу физики. Ч. 2. Под ред. Сивухина Д.В. – М.: Наука 1964, 412 с.