

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Томский государственный университет систем управления  
и радиоэлектроники  
(ТУСУР)

Кафедра физики

А.В. Лячин

ФИЗИКА

Часть 3

Учебно-методическое пособие для студентов всех специальностей

2024

**УДК 531.1**  
**ББК 22.3**

**Рецензент:**

**Климов А.С.**, профессор кафедры физики ТУСУР, д.т.н.

**Лячин, Александр Владимирович**

**Физика. Учебно-методическое пособие для студентов ТУСУР всех направлений подготовки. Часть 3** / Под редакцией А.В. Лячина. Томск, ТУСУР, 2024, 104 с.

Учебно-методическое пособие представляет собой краткое изложение курса физики, изучаемого студентами ТУСУР во втором семестре курса физики. Даны основные определения физических величин, формулировки законов и расчётные формулы.

Весь материал пособия разбит на 2 раздела «Основы квантовой механики» и «Элементы физики твёрдого тела». Каждый из разделов сопровождается краткой теорией по рассматриваемой теме. Также приводится подробный разбор решений нескольких задач и тестовых заданий каждой темы.

Пособие предназначено для проведения выравнивающих курсов по физике для студентов ТУСУР всех направлений подготовки.

Одобрено на заседании каф. физики протокол № 116 от 22.11.2024

УДК 531.1  
ББК 22.3

© Лячин А.В., 2024

© Томск. гос. ун-т систем упр. и радиоэлектроники, 2024

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
Раздел 1. Основы квантовой механики.....	5
Раздел 2. Элементы физики твердого тела.....	67
Список рекомендуемой литературы .....	103
Приложение. Некоторые физические постоянные и единицы. Значения приставок единиц измерения .....	104

## ВВЕДЕНИЕ

Настоящее пособие предназначено для проведения выравнивающих курсов по физике со студентами-первокурсниками ТУСУР, и для преподавателей, осуществляющих их подготовку. Первостепенное значение имеет умение студента анализировать физические явления и процессы, происходящие в различных системах, адекватно понимать условия задач по физике, уверенно решать задачи и грамотно оформлять их решение. Поэтому основная цель данного пособия – способствовать приобретению этих навыков. Пособие призвано помочь лучше усвоить курс при самостоятельной работе или при обучении на выравнивающих курсах.

Весь материал пособия разбит на 2 раздела по тематическому принципу. Каждый из разделов предваряется кратким обзором теоретических положений по рассматриваемой теме. Следует иметь в виду, что этот обзор преследует, в основном, справочные цели и не может заменить углубленное, систематическое изучение материала физики по учебникам и учебно-методическим пособиям для студентов. Применение изложенных сведений демонстрируется на примерах решения нескольких характерных задач и тестовых заданий, охватывающих содержание рассматриваемой темы.

В приложении 1 приведены константы, которые могут пригодиться при решении задач.

РАЗДЕЛ 1. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ  
ГЛАВА 1. ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА.

1.1.1. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ.

Корпускулярно-волновой дуализм имеет универсальное значение: материальные частицы с ненулевой массой покоя  $m_0$  (электроны, протоны, нейтроны и др.) также как и фотоны обладают волновыми свойствами. Волновые свойства частиц наглядно проявляются в процессах их распространения (дифракция электронов), а корпускулярные – при взаимодействии частиц.

Согласно гипотезе де Бройля каждой движущейся частице должна быть сопоставлена волна (волна де Бройля). Для получения связи между параметрами волны (частотой  $\omega$ , длиной  $\lambda$ , волновым вектором  $\vec{k}$ ) и величинами, характеризующими движение частиц (импульсом  $\vec{p}$ , скоростью  $\vec{v}$ , полной энергией  $E$ ), были использованы правила перехода от волновой картины к корпускулярной, полученные в оптике для фотонов.

Длина волны де Бройля для материальной частицы определяется формулой де Бройля:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.1.1)$$

где  $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная Планка. Импульс частицы в формуле (1.1.1) для классического и релятивистского случаев находится с использованием формул:

$$\text{если } v \ll c: \quad \vec{p} = m_0 \vec{v}, \quad p = \sqrt{2m_0 E_{\kappa}}, \quad (1.1.2)$$

$$\text{если } v \approx c: \quad \vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}},$$

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4} = \frac{1}{c} \sqrt{E_{\kappa} (E_{\kappa} + 2m_0 c^2)}, \quad (1.1.3)$$

где  $c$  – скорость света в вакууме,  $E_{\kappa}$  – кинетическая энергия частицы.

Частота волны связана с энергией частиц соотношением  $\omega = E/\hbar$ , где  $\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с. Полная энергия частиц  $E$  определяется по формулам:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad \text{или} \quad E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4. \quad (1.1.4)$$

Волна де Бройля характеризуется волновым вектором  $\vec{k}$ , который связан с импульсом  $\vec{p}$  частицы соотношением

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}. \quad (1.1.5)$$

С учётом выше изложенного (1.1.2) и (1.1.3) связь длины волны де Бройля с кинетической энергией

$$\text{если } v \ll c: \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_k}}, \quad (1.1.6)$$

$$\text{если } v \approx c: \quad \lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_k (E_k + 2m_0 c^2)}}. \quad (1.1.7)$$

Для наблюдения волновых свойств частицы необходимо создать такие условия, при которых геометрические размеры параметра прибора, с помощью которого они наблюдаются, должны быть сравнимы с длиной волны де Бройля. Для волны де Бройля подходящей дифракционной решеткой может быть кристаллическая структура. При изучении отражения электронов от поверхности монокристалла (трехмерная дифракционная решетка) для расчета направления, в котором для данной длины волны наблюдаются дифракционные максимумы, используют условие Вульфа-Бреггов:

$$2d \sin \alpha_0 = m\lambda, \quad (1.1.8)$$

где  $\alpha_0$  – угол скольжения пучка микрочастиц,  $d$  – межплоскостные расстояния,  $m$  – порядок дифракционного максимума ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ). Схема дифракции электронов при отражении от поверхности кристалла показана на (рис. 1.1 а).

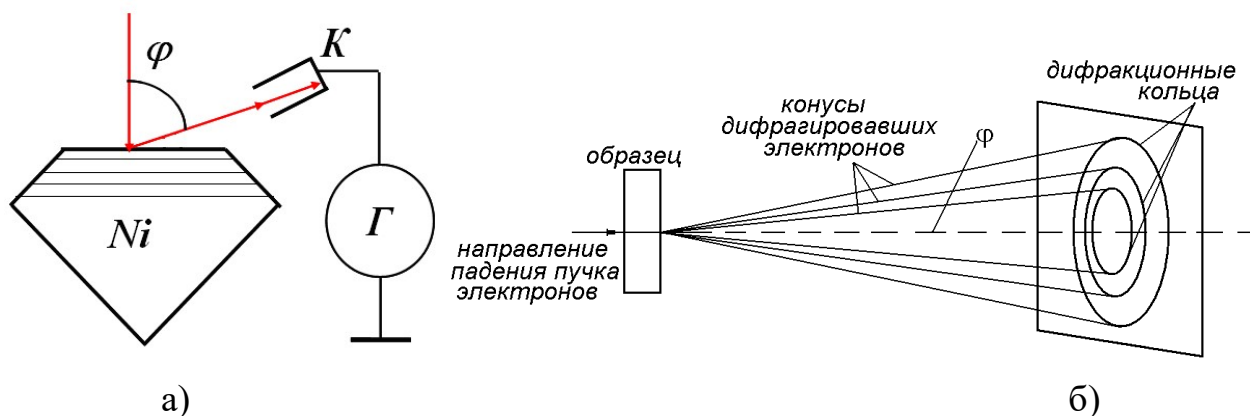


Рисунок 1.1 – а) Опыт Дэвисона и Джермера. Схема дифракции электронов при отражении от поверхности кристалла; б) Схема дифракции электронов при прохождении электронов через тонкие кристаллические пленки

Условие главных максимумов, возникающих при прохождении волны через одномерную дифракционную решетку, определяется выражением:

$$d \sin \varphi = \pm m \lambda, \quad (1.1.9)$$

где  $\varphi$  – угол, который составляет направление распространения электронов, образующих дифракционный максимум  $m$ -го порядка в направлении их первоначального движения. Дифракция электронов при прохождении электронов через тонкие кристаллические пленки изображена на рис. 1.1 б).

### 1.1.2. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ

Наличие волновых свойств у микрочастицы вносит ограничения к применению понятий (импульс, координата и др.), характеризующих частицу в классической механике.

Согласно принципу дополнительности, сформулированному Бором, получение экспериментальной информации об одних физических величинах, описывающих микрообъект, неизбежно связано с потерей информации о некоторых других величинах – дополнительных (сопряжённых) к первым. Примерами дополнительных (сопряжённых) величин являются координата и импульс частицы, кинетическая и потенциальная энергия и др. Критерием применимости к микрочастицам классических понятий служит соотношение неопределенности Гейзенберга, которое для координат и импульсов имеет вид:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.1.10)$$

где  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  – неопределенность значения соответствующей координаты, а  $\Delta p_x$ ,  $\Delta p_y$ ,  $\Delta p_z$  – неопределенность значения проекции ее импульса на заданную ось. Вследствие малости  $\hbar$  по сравнению с макроскопическими величинами той же размерности действия [Дж·с] соотношения неопределенности существенны в основном для явлений атомных масштабов и не проявляются в опытах с макроскопическими телами.

Из соотношения неопределенности следует вывод о невозможности точно измерить одновременно координату микрочастицы вдоль некоторой оси и проекцию импульса на ту же ось. Микрочастицы не обладают траекториями в классическом понимании этого слова, т.к. они распространяются по волновым законам.

Соотношение неопределенности для энергии частицы  $E$  и времени  $t$  имеет вид:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.1.11)$$

где  $\Delta E$  – неопределенность значения энергии нестационарного состояния замкнутой системы, а  $\Delta t$  – время, в течение которого существенно меняются средние значения физических величин в этой системе. Энергии возбужденных уровней не могут быть строго определенными, т.е. уровни обладают некоторой шириной  $\Delta E$ .

### 1.1.3. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. При каких значениях кинетической энергии электрона и протона ошибка в дебройлевской длине волны, определяемой по нерелятивистской формуле, не превышает 1 %?

Дано:

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$$

$$m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

$$\eta = 1 \%$$

Найти:

$$E_{ке} = ?$$

$$E_{кр} = ?$$

Решение:

В задаче рассматриваются волны де Бройля, описывающие движение электрона и протона с различными кинетическими энергиями  $E_k$ . Следует определить значения кинетической энергии для электрона  $E_{ке}$  и протона  $E_{кр}$ , при которых расчёт длины волны  $\lambda$  де Бройля по нерелятивистской формуле (1.1.6)

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_k}} \quad (1)$$



отличается не более чем на 1 % от величины  $\lambda_p$ , вычисленной по релятивистской формуле (1.1.7)

$$\lambda_p = \frac{hc}{\sqrt{E_\kappa(E_\kappa + 2m_0c^2)}}. \quad (2)$$

Относительная ошибка  $\eta$  определяется по формуле:

$$\eta = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{(\lambda - \lambda_p)}{\lambda}.$$

Выразим относительную погрешность  $\eta = \frac{(\lambda - \lambda_p)}{\lambda}$  через кинетическую энергию частицы с массой покоя  $m_0$ , используя формулы (1) и (2):

$$\eta = \frac{h}{\sqrt{2m_0E_\kappa}} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{E_\kappa}{2m_0c^2}}} \right) \cdot \frac{\sqrt{2m_0E_\kappa}}{h} = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{E_\kappa}{2m_0c^2}}}. \quad (3)$$

Функцию  $\sqrt{1 + \frac{E_\kappa}{2m_0c^2}}$  разложим в ряд и ограничимся первыми двумя членами ( $E_\kappa \ll 2m_0c^2$ ). В таком приближении получим:

$$\sqrt{1 + \frac{E_\kappa}{2m_0c^2}} \approx 1 - \frac{E_\kappa}{4m_0c^2}. \quad (4)$$

Подставим найденные значения функции (4) в равенство (3):

$$\eta = \frac{(\lambda - \lambda_p)}{\lambda} = \frac{E_\kappa}{4m_0c^2}.$$

Выразим величину кинетической энергии частицы через погрешность  $\eta$ :

$$E_\kappa = 4m_0c^2\eta. \quad (5)$$

Подставим в формулу (5) численные значения:

а) для электрона:

$$E_{ke} = 0,01 \cdot 4 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 9 \cdot 10^{16} = 3,276 \cdot 10^{-15} \text{ Дж} = 20,4 \text{ кэВ};$$

б) для протона:

$$E_{kp} = 0,01 \cdot 4 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \cdot 9 \cdot 10^{16} = 6,01 \cdot 10^{-12} \text{ Дж} = 37,575 \text{ МэВ}.$$

Ответ: $E_{ke} = 20,4 \text{ кэВ}$ , $E_{kp} = 37,575 \text{ МэВ}$ .
--

2. Пучок электронов падает нормально на поверхность монокристалла никеля. В направлении, составляющем угол  $55^\circ$  с нормалью к поверхности, наблюдается максимум отражения четвертого порядка при кинетической энергии падающих электронов 180 эВ. Вычислить межплоскостное расстояние, соответствующее данному отражению (см. рис. 1.1 а).

Дано:  
 $\varphi = 55^\circ$   
 $E_k = 180 \text{ эВ} = 2,88 \cdot 10^{-17} \text{ Дж}$   
 $m = 4$   
 $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$   
Найти:  
 $d = ?$

Решение:  
 Микрочастицы обладают волновыми свойствами, поэтому движение свободной частицы описывается плоской волной де Бройля, длина которой рассчитывается по формуле  $\lambda = h/p$ . Волны де Бройля дифрагируют по обычным оптическим

законам, если  $\lambda \sim d$ , где  $d$  – размеры препятствия, на котором происходит дифракция. Для расчета направления, в котором для данной длины волны получается максимум при дифракции от монокристалла (пространственной дифракционной решетки) используют условие Вульфа-Бреггов (1.1.8). В данной задаче  $d$  является межплоскостным расстоянием, которое нужно найти, а величина  $\lambda$  определяется из формулы де Бройля. В условиях этой задачи  $\frac{E_k}{2m_0c^2} \ll 1$  для электрона, поэтому при расчете  $\lambda$  можно

пользоваться нерелятивистской формулой для определения длины волны де Бройля.

Воспользуемся формулой Вульфа-Бреггов:

$$2d \sin \alpha_0 = m\lambda. \quad (1)$$

Длину волны  $\lambda$  найдем из нерелятивистской формулы де Бройля:

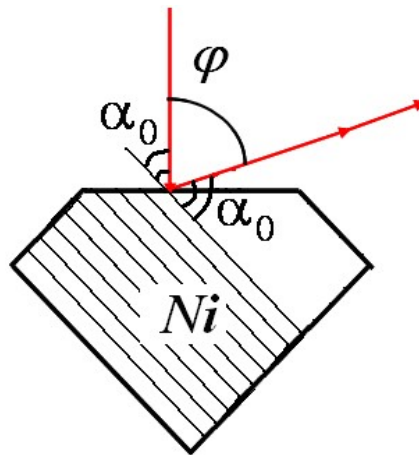
$$\lambda = h/p.$$

Подставим значение  $\lambda$  в выражение (1) и получим

$$2d \sin \alpha_0 = m h/p.$$

Найдем межплоскостное расстояние  $d$ , учитывая, что  $p = \sqrt{2m_0E_k}$

$$d = \frac{hm}{2\sqrt{2m_0E_k} \sin \alpha_0}. \quad (2)$$



Из рисунка видно, что  $\alpha_0 = 90^\circ - \varphi/2 = 62,5^\circ$ .

Подставим численные значения в формулу (2):

$$d = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 4}{2 \cdot \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 2,88 \cdot 10^{-17} \cdot 0,887}} = 2,06 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Ответ:  $d = 2,06 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$

3. Параллельный пучок электронов падает нормально на диафрагму с узкой прямоугольной щелью, ширина которой  $a = 2 \text{ мкм}$ . Определить скорость электронов, если известно, что на экране, отстоящем от щели на расстоянии  $l = 50 \text{ см}$ , ширина центрального дифракционного максимума  $b = 80 \text{ мкм}$ .

Дано:

$$a = 2 \text{ мкм} = 2 \cdot 10^{-6} \text{ м}$$

$$l = 50 \text{ см} = 0,5 \text{ м}$$

$$b = 80 \text{ мкм} = 8 \cdot 10^{-5} \text{ м}$$

Найти:

$$v = ?$$

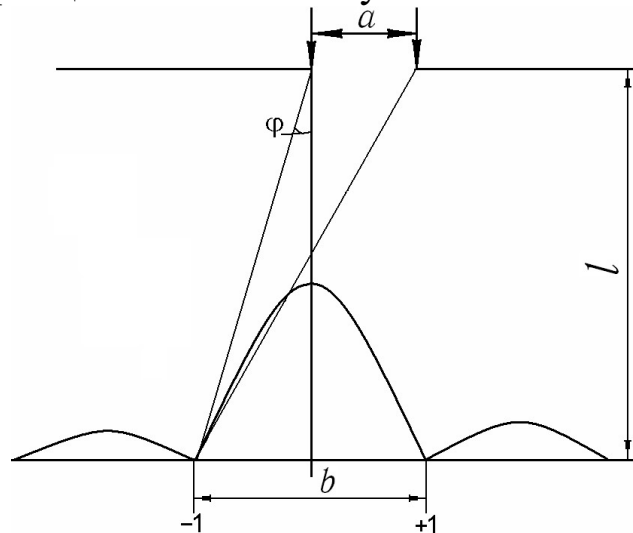
Решение:

Дифракция электронов является следствием волновой природы частиц. Для определения скорости электронов применим формулу де Бройля:  $\lambda = \frac{h}{p}$ .

Для случая  $v \ll c$ , получим  $v = \frac{h}{m_0 \lambda}$ .

Дифракционная картина, возникающая при прохождении через узкую щель параллельного пучка электронов, соответствует дифракционной картине, полученной от этой же щели при освещении её параллельным пучком монохроматического света, длина волны которого равна длине волны де Бройля для электрона (см. рисунок). Это означает, что положение дифракционных минимумов в случае дифракции электронов от щели можно определять по формуле:

$a \sin \varphi = \pm m \lambda$ , где  $a$  – ширина щели,  $\lambda$  – длина волны де Бройля,  $m$  – порядок дифракционного минимума.



Кривая, изображённая на рисунке, показывает распределение интенсивности электронного пучка в зависимости от угла  $\varphi$ . Центральный максимум  $m = 0$  заключён между двумя минимумами первого порядка ( $m = \pm 1$ ). Его ширина  $b$  зависит от угла дифракции  $\varphi$ , соответствующего минимуму первого порядка:

$$a \sin \varphi = \lambda. \quad (1)$$

В силу малости угла  $\varphi$  из рисунка получим

$$\sin \varphi \approx \operatorname{tg} \varphi = \frac{b}{2l}. \quad (2)$$

Подставим значение (2) в (1):

$$\frac{ab}{2l} = \lambda. \quad (3)$$

Учитывая, что  $\lambda = \frac{h}{m_0 v}$ , получим

$$\frac{ab}{2l} = \frac{h}{m_0 v}.$$

Выразим скорость:

$$v = \frac{2lh}{abm_0}.$$

Подставим численные значения:

$$v = \frac{2 \cdot 0,5 \cdot 6,62 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 10^{-6} \cdot 8 \cdot 10^{-5} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} = 4,55 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

При расчете скорости было учтено, что  $m = m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг, т.е.  $v \ll c$ . Следовательно, истинное значение скорости  $v$  будет не больше вычисленного нами. Таким образом, предположение о том, что  $v \ll c$ , соответствует действительности.

Если бы полученный результат противоречил неравенству  $v \ll c$ , это значило бы, что при расчетах электрон следовало рассматривать как релятивистскую частицу с массой

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}},$$

импульс которой равен:  $p = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}$ .

Ответ:  $v = 4,55 \cdot 10^6$  м/с.

4. Атом испустил фотон с длиной волны  $\lambda = 0,55$  мкм за время  $\tau = 10^{-8}$  с. Оценить величину неопределенности, с которой можно установить координату фотона в направлении его движения, а также относительную неопределенность его длины волны.

Дано:  
 $\lambda = 0,55$  мкм =  $5,5 \cdot 10^{-7}$  м  
 $\tau = 10^{-8}$  с  
 $c = 3 \cdot 10^8$  м/с  
Найти:  
 $\Delta x = ?$        $\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = ?$

Решение:  
 Неопределенность в координате фотона определяется как  $\Delta x = c\tau$ , где  $c$  – скорость фотона. Неопределенность  $\Delta E$  в энергии фотона определяется временем  $\tau = \Delta t$ , в течение которого частица находится в нестационарном состоянии, из соотношения

неопределенности:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \frac{\hbar}{2}. \quad (1)$$

Чтобы выразить  $\Delta E$  через неопределенность в длине волны  $\Delta \lambda$ , учтем, что

$$E = h\nu = hc/\lambda. \quad (2)$$

Найдем связь  $\Delta \lambda$  и  $\Delta E$ . Для этого продифференцируем (2):

$$\Delta E = h \frac{c}{\lambda^2} \Delta \lambda. \quad (3)$$

Полученное выражение (3) подставим в соотношение неопределенности (1). В результате имеем приближенное равенство

$$h \frac{c}{\lambda^2} \Delta \lambda \tau \approx \frac{\hbar}{2}.$$

Выразим величину относительной неопределенности длины волны:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx \frac{\hbar\lambda}{2c\tau\hbar} = \frac{\hbar\lambda}{2c\tau 2\pi\hbar} = \frac{\lambda}{4\pi c\tau}.$$

Подставим численные значения:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx \frac{55 \cdot 10^{-8}}{4 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-8}} \approx 1,46 \cdot 10^{-8},$$

$$\Delta x = c\tau = 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-8} = 3 \text{ м.}$$

Ответ:  $\Delta x = 3 \text{ м, } \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 1,46 \cdot 10^{-8}.$

5. След пучка электронов на экране электронно-лучевой трубки имеет диаметр  $d \approx 0,5 \text{ мм}$ . Расстояние от электронной пушки до экрана  $l \approx 20 \text{ см}$ , ускоряющее напряжение  $U = 10 \text{ кВ}$ . Оценить с помощью соотношения неопределённости порядок неопределённости координаты электрона на экране.

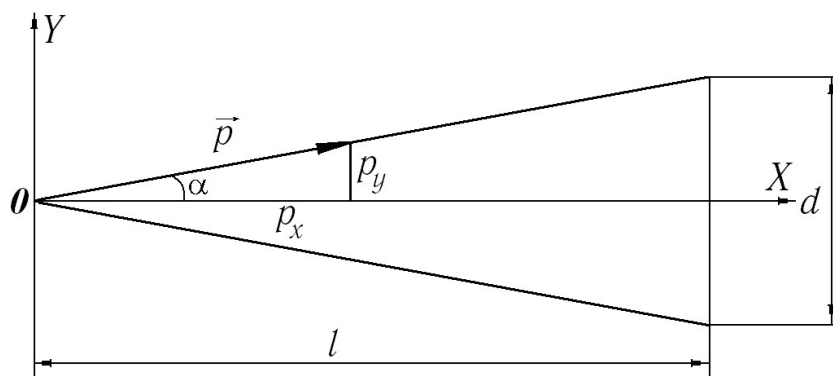
Дано:  
 $d \approx 0,5 \text{ мм} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ м}$   
 $l \approx 20 \text{ см} = 0,2 \text{ м}$   
 $U = 10 \text{ кВ} = 10^4 \text{ В}$   
 $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$   
 $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$   
 Найти:  
 $\Delta y = ?$

Решение:

Неопределённость в координате электрона на экране электронно-лучевой трубки определяется из соотношения неопределённости  $\Delta y \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_y}$ . Модуль

вектора импульса можно найти из соотношения  $p = \sqrt{2mE_k}$ , если

рассматривать электрон как нерелятивистскую частицу. Кинетическая энергия электрона в ускоряющем его движении электрическом поле с напряжением  $U$  равна  $E_k = eU$ , где  $e$  – заряд электрона, поэтому  $p = \sqrt{2meU}$ . Проекцию  $p_y = p \sin \alpha$  найдём, используя рисунок, где  $\sin \alpha \approx \text{tg} \alpha = \frac{d}{2l}$ . Неопределённость в проекции импульса  $p_y$  лежит в интервале от  $p \sin \alpha$  до  $-p \sin \alpha$ , т.е.  $\Delta p_y = 2p_y \approx p_y$ .



Неопределённость в координате  $\Delta y$  найдём, учитывая вышеприведенные рассуждения из формулы:

$$\Delta y = \frac{\hbar}{2\Delta p_y} = \frac{\hbar}{2p_y} = \frac{2l\hbar}{2pd} = \frac{l\hbar}{d\sqrt{2meU}}.$$

Таким образом, неопределённость координаты электрона на экране:

$$\Delta y = \frac{l\hbar}{d\sqrt{2meU}}.$$

Подставим численные значения.

$$\Delta y = \frac{0,2 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{5 \cdot 10^{-4} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^4}} = 7 \cdot 10^{-9} \approx 10^{-8} \text{ м.}$$

Ответ:  $\Delta y \approx 10^{-8}$  м.

#### 1.1.4. ПРИМЕРЫ ОТВЕТОВ НА ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

1. Какое из приведённых ниже утверждений, правильно отражает суть гипотезы де Бройля?

1) Свет – это электромагнитное излучение, испускаемое порциями (квантами);

2) Все частицы, имеющие конечный импульс, обладают волновыми свойствами, и их движение может быть сопоставлено с некоторым волновым процессом;

3) Свет не только излучается, но также распространяется в пространстве и поглощается веществом в виде отдельных дискретных квантов электромагнитного излучения - фотонов;

4) Рентгеновское излучение может иметь как сплошной спектр (тормозное излучение), так и дискретный (характеристическое излучение).

*Решение:* Согласно гипотезе де Бройля каждой движущейся частице должна быть сопоставлена волна (волна де Бройля). Корпускулярно-волновой дуализм имеет универсальное значение: материальные частицы с ненулевой массой покоя  $m_0$  (электроны, протоны, нейтроны и др.) также как и фотоны обладают волновыми свойствами. Правильный вариант ответа: **2) Все частицы, имеющие конечный импульс, обладают волновыми свойствами, и их движение может быть сопоставлено с некоторым волновым процессом.**

2. Длина волны де Бройля при  $v \ll c$  определяется по формуле:

а)  $\lambda = h/p$ ;

б)  $\lambda = E/c$ ;

в)  $\lambda = h/(mv)$ ;

г)  $\lambda = h/(mc)$ ,

где  $p$  – импульс частицы;  $E$  – энергия частицы;  $v$  – скорость частицы;  $c$  – скорость света в вакууме.

1) а, б;

2) а, в;

3) а, г;

4) б, в;

5) б, г;

6) в, г.

*Решение:* Т.к., по условию,  $v \ll c$ , то мы имеем дело с классическим движением частицы. Для этого случая импульс равен  $p = mv$ , а длина волны де Бройля рассчитывается по формуле  $\lambda = h/p$ . Таким образом, условию задания удовлетворяют формулы под номерами а) и в). Правильный вариант ответа: **2) а, в.**

3. Вычислить длину волны де Бройля для протона, движущегося со скоростью  $v = 0,6 \cdot c$ . Ответ дать в фемтометрах. (1 фм =  $10^{-15}$  м;  $c$  – скорость света в вакууме).

1) 1,26;

2) 1,57;

3) 1,76;

4) 2,03.

*Решение:* Формула для вычисления длина волны де Бройля:  $\lambda = h/p$ . Т.к., по условию,  $v \approx c$ , то мы имеем дело с релятивистским движением частицы. Для этого случая импульс частицы можно рассчитать по формуле:

$$p = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}.$$

Учтем, что масса покоя протона (см. приложение) равна  $m_0 = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг. Таким образом,

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v} \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} = 1,76 \cdot 10^{-15} \text{ м} = 1,76 \text{ фм}.$$



Правильный вариант ответа: **3) 1,76.**

4. Для каких динамических параметров микрочастиц выполняется соотношение неопределенностей Гейзенберга?

- 1) для любых;
- 2) для величин, имеющих дискретный спектр значений;
- 3) для стационарных величин;
- 4) для величин, имеющих непрерывный спектр значений;
- 5) для сопряженных величин, имеющих дискретный спектр значений;
- 6) для сопряженных величин, имеющих любой спектр значений;
- 7) для сопряженных величин, имеющих непрерывный спектр значений.

*Решение:* Согласно принципу дополнительности, сформулированному Бором, соотношение неопределенностей Гейзенберга выполняется только для **сопряжённых** величин (характеристик). При этом ограничений на спектр значений этих величин (дискретный или непрерывный) нет. Поэтому, соотношение неопределенностей Гейзенберга выполняется для сопряжённых величин с любым спектром значений, как для квантовых, так и для классических объектов. Соотношения неопределенности существенны в основном для явлений атомных масштабов и не проявляются в опытах с макроскопическими телами. Правильный вариант ответа: **6) для сопряженных величин, имеющих любой спектр значений.**

5. Протон локализован в пространстве в пределах  $\Delta x = 1$  мкм. Учитывая, что постоянная Планка  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с, а масса протона  $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг, а правая часть в соотношении неопределённости равна  $\hbar$ , неопределенность скорости  $\Delta v_x$  (в м/с) составляет не менее...

- |                           |                           |
|---------------------------|---------------------------|
| 1) $6,28 \cdot 10^{-2}$ ; | 2) $1,59 \cdot 10^{-2}$ ; |
| 3) $1,59 \cdot 10^{-5}$ ; | 4) $6,28 \cdot 10^{-5}$ . |

*Решение:* Согласно соотношению неопределенности Гейзенберга для координат и импульсов (1.1.10):

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar.$$

Неопределённость проекции импульса на ось  $x$ :  $\Delta p_x = m_p \cdot \Delta v_x$ . Тогда,  $\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m_p \Delta x} = 6,28 \cdot 10^{-2}$  м/с.

Правильный вариант ответа: **1)  $6,28 \cdot 10^{-2}$ .**

## ГЛАВА 2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

### 1.2.1. ЧАСТИЦЫ В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

В развитие идеи де Бройля о волновых свойствах вещества Эрвин Шредингер получил в 1926 г. свое знаменитое уравнение, известное сейчас как уравнение квантовой механики. Он обобщил догадку де Бройля на случай, когда электроны движутся не в свободном пространстве, а во внешнем поле, например, в кулоновском поле ядра.

Шредингер сопоставил движению микрочастицы комплексную функцию координат и времени  $\psi$ , которую назвал волновой функцией (её называют пси-функцией, а уравнение – волновым уравнением Шредингера нерелятивистской квантовой механики).

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (1.2.1)$$

где  $E$  – полная энергия микрочастицы. Вид  $\psi$ -функции получается из решения нестационарного уравнения:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (1.2.2)$$

Здесь  $m$  – масса частицы;  $i$  – мнимая единица;  $U(x, y, z, t)$  – функция координат и времени, имеет смысл *эффективного потенциала силового поля*, в котором движется частица. Т.е. условия, в которых движется частица;  $\nabla^2$  – оператор Лапласа

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}. \quad (1.2.3)$$

Если силовое поле, в котором движется частица, стационарно, то функция  $U$  не зависит явно от времени и имеет смысл *потенциальной энергии*. В этом случае уравнение Шредингера имеет вид:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0. \quad (1.2.4)$$

Уравнение (1.2.4) называется уравнением Шредингера для стационарных состояний.

Сама  $\psi$ -функция физического смысла не имеет, она определяет состояние частицы, энергетическое состояние которой описывается набором квантовых чисел: главного –  $n$ , орбитального –  $l$ , магнитного –  $m$  и спинового –  $m_s$  ( $s$ ).

Физический смысл имеет квадрат модуля  $\psi$ -функции  $|\psi|^2 = \frac{d\rho}{dV}$  – плотность вероятности нахождения частицы в единице объема.

Вероятность нахождения частицы  $W$  в некотором объеме  $V$  определяется по формуле

$$W = \int_0^V |\psi|^2 dV. \quad (1.2.5)$$

Кроме того, волновая функция должна удовлетворять *стандартным условиям*:

1) волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной;

2) производные  $\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z}, \frac{\partial \psi}{\partial t}$  должны быть непрерывны;

3) волновая функция должна удовлетворять условию нормировки. Условие нормировки предполагает, что частица в рассматриваемом объеме есть и вероятность её нахождения там равна единице:

$$\oint_V |\psi|^2 dV = 1. \quad (1.2.6)$$

Решение стационарного уравнения для трехмерного случая громоздко. Поэтому, рассмотрим квантование частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме (потенциальном ящике) шириной  $l$ . Такое состояние частицы называется связанным состоянием. Частица может двигаться только вдоль оси  $X$ . Движение частицы ограничено непроницаемыми для неё стенками с координатами:  $x = 0$  и  $x = l$ .

Потенциальная яма – область пространства, в которой потенциальная энергия частицы имеет локальный минимум. В этой области потенциальную энергию можно положить нулю, или считать малой, по сравнению с другими частями пространства. Примером нахождения частицы в потенциальной яме можно считать кулоновскую яму взаимодействия электронов в атоме с ядром.

Потенциальная энергия частицы, находящейся в прямоугольной одномерной потенциальной яме, будет принимать значения:

$$U = 0 \text{ при } 0 \leq x \leq l \quad \text{и} \quad U = \infty \text{ при } x < 0 \text{ и } x > l.$$

Стационарное уравнение в этом случае будет иметь вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0. \quad (1.2.7)$$

Уравнение (1.2.7) имеет решение не при любых значениях параметра  $E$ , а лишь при соответствующих значениях, называемых *собственными значениями энергии*  $E_n$ . Соответствующие значения волновой функции называются *собственными  $\psi$ -функциями*:

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi x}{l}. \quad (1.2.8)$$

Условие нормировки (1.2.6) позволяет определить амплитуду волновой функции

$$A = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Таким образом, решая уравнение Шредингера (для одномерной ямы с бесконечно высокими стенками), можно получить:

1) Выражения для расчета собственных значений энергии

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2. \quad (1.2.9)$$

2) Вид собственных  $\psi$ -функции:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right). \quad (1.2.10)$$

3) Плотность вероятности нахождения частицы в определенном месте ямы:

$$|\psi(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right). \quad (1.2.11)$$

4) Вероятность нахождения частицы в определенном месте ямы

$$W = \frac{2}{l} \int_0^x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx. \quad (1.2.12)$$

Из решения уравнения следует очень важные выводы:

- 1) спектр энергии частицы в потенциальной яме – дискретный;
- 2) на ширине ямы укладывается целое число полуволен  $l = n \cdot \lambda/2$ .

Из рисунка 1.2 б видно, что в отличие от классической частицы, которая с равной вероятностью может находиться в любом месте потенциальной ямы, микрочастица *не может находиться у краёв ямы и в определённых точках на каждом энергетическом уровне*. В то же время, наиболее вероятное нахождение частицы на первом уровне –

середина ямы, на втором уровне в точке с координатой  $x = l/4$  и  $x = 3l/4$  и т.д.

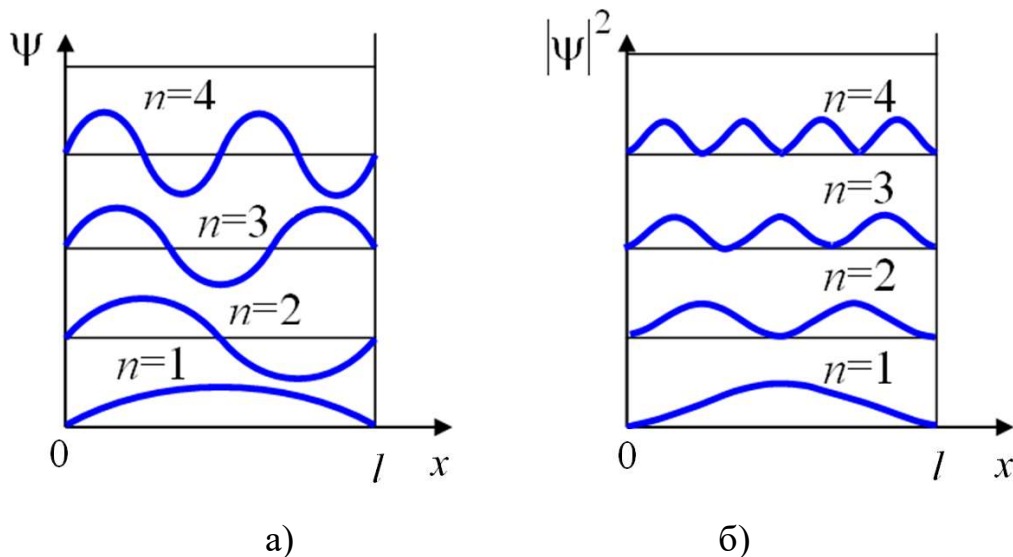


Рисунок 1.2 – а) Графическое изображение  $\psi$ -функции в зависимости от  $x$ ; б) график плотности вероятности нахождения частицы в зависимости от  $x$

### 1.2.2. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Частица находится в возбуждённом состоянии ( $n = 2$ ) в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $l$ . В каких точках интервала  $0 < x < l$  плотность вероятности координаты частицы имеет максимальное значение?

**Дано:**  
 $n = 2$   
 $|\Psi(x)|^2_{\max}$   
**Найти:**  
 $x = ?$

**Решение:**  
 а) Плотность вероятности координаты частицы – это квадрат модуля пси-функции

$$|\psi|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{l} x\right). \quad (1)$$

б) Условие максимума  $|\psi(x)|^2$  выглядит следующим образом

$$\sin \frac{n\pi}{l} x = 1. \quad (2)$$

в) Из (2) следует, что  $\frac{n\pi}{l} x = (2k + 1) \frac{\pi}{2}$ , откуда

$$x = (2k + 1) \frac{l}{2n}. \quad (3)$$

г) По условию задачи  $n = 2$ , следовательно, минимальное значение  $x$ , при котором плотность вероятности координаты частицы имеет максимальное значение, будет при  $k = 0$ . Из (3) получаем

$$x_1 = l/4.$$

д) Следующее значение  $x$ , при котором  $|\psi|^2$  имеет максимальное значение, будет при  $k = 1$ . Из (3) получаем

$$x_2 = 3l/4.$$

Ответ:  $x_1 = l/4$ ;  $x_2 = 3l/4$ .

2. Частица массой  $0,67 \cdot 10^{-26}$  кг находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме в третьем возбуждённом состоянии. Найти (в нм) ширину ямы, если энергия частицы в этом состоянии равна  $3,3 \cdot 10^{-5}$  эВ.

Дано:

$$m = 0,67 \cdot 10^{-26} \text{ кг}$$

$$n = 4$$

$$E = 3,3 \cdot 10^{-5} \text{ эВ} =$$

$$5,28 \cdot 10^{-24} \text{ Дж}$$

Найти:

$$l = ?$$

Решение:

а) Собственное значение энергии  $E_n$  микрочастицы массой  $m$ , находящейся в одномерной потенциальной яме шириной  $l$ , на  $n$ -том энергетическом уровне определяется выражением (1.2.9)

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2. \quad (1)$$

б) Ширину ямы  $l$  найдём из (1)

$$l = \frac{\hbar \pi n}{\sqrt{2mE}}. \quad (2)$$

в) Подстановка числовых данных в (2) даёт искомую ширину потенциальной ямы

$$l = \frac{3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 4}{\sqrt{2 \cdot 0,67 \cdot 10^{-26} \cdot 5,28 \cdot 10^{-24}}} = 4,96 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 4,96 \text{ нм}.$$

Ответ:  $l = 4,96 \text{ нм}$ .

3. Электрон в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l = 200$  пм с бесконечно высокими стенками находится в возбуждённом состоянии ( $n = 4$ ). Определить вероятность обнаружения  $W$  электрона в первой четверти ямы.

Дано:

$$a = 200 \text{ пм} = 2 \cdot 10^{-7} \text{ м}$$

$$n = 4$$

Найти:

$$W = ?$$

Решение:

а) Вероятность обнаружить частицу в интервале  $x_1 < x < x_2$  можно определить по формуле

$$W = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx, \quad (1)$$

где  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)$  – нормированная собственная волновая функция, соответствующая данному состоянию,  $n = 1, 2, \dots$

б) Возбуждённому состоянию  $n = 4$  отвечает собственная  $\psi$ -функция

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{4\pi}{l}x\right). \quad (2)$$

в) Согласно условию задачи  $x_1 = 0$ ,  $x_2 = l/4$ , подставив (2) в (1), получим выражение для вероятности обнаружения электрона в области  $0 < x < l/4$

$$W = \frac{2}{l} \cdot \int_0^{l/4} \sin^2\left(\frac{4\pi}{l}x\right) dx. \quad (3)$$

г) Используя тригонометрическое тождество

$$\sin^2 \alpha = \frac{1 - \cos 2\alpha}{2},$$

перепишем выражение (3)

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{l} \left[ \int_0^{l/4} 1 \cdot dx - \int_0^{l/4} \cos\left(\frac{8\pi x}{l}\right) dx \right] = \frac{1}{l} \left[ \frac{l}{4} - \frac{l}{8\pi} \sin \frac{8\pi}{l} x \Big|_0^{l/4} \right] = \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{8\pi} (\sin 2\pi - \sin 0). \end{aligned}$$

д) Расчёт даёт

$$W = \frac{1}{4} = 0,25.$$

Ответ:  $W = 0,25$ .

4. Частица массы  $m = 0,45 \cdot 10^{-30}$  кг находится в основном состоянии в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Максимальное значение плотности вероятности местонахождения частицы  $|\psi_n(x)|_{\max}^2 = 10^9 \text{ м}^{-1}$ . Найти энергию частицы  $E$  в данном состоянии. Ответ выразить в электрон-вольтах.

Дано:

$$m = 0,45 \cdot 10^{-30} \text{ кг}$$

$$|\psi_n(x)|_{\text{max}}^2 = 10^9 \text{ м}^{-1}$$

$$n = 1$$

Найти:

$$E = ?$$

Решение:

а) Согласно (1.2.9) собственное значение энергии  $E_n$  микрочастицы массой  $m$ , находящейся в одномерной потенциальной яме шириной  $l$  на  $n$ -ом энергетическом уровне,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2. \quad (1)$$

б) Ширина потенциальной ямы не известна, но её можно определить из выражения для плотности вероятности местонахождения частицы (1.2.11)

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{l} x\right). \quad (2)$$

в) По условию задачи задано максимальное значение плотности вероятности  $\sin^2\left(\frac{n\pi}{l} x\right) = 1$  и из выражения (2) имеем

$$l = \frac{2}{|\psi|_{\text{max}}^2}. \quad (3)$$

г) Подставляя (3) в (1), имеем

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2 \left(|\psi|_{\text{max}}^2\right)^2}{8m}. \quad (4)$$

д) Численный расчёт даёт искомую величину энергии

$$E = \frac{\left(3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 10^9\right)^2}{8 \cdot 0,45 \cdot 10^{-30}} = 3,02 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} = 0,19 \text{ эВ}.$$

Ответ:  $E = 0,19 \text{ эВ}$ .

5. Микрочастица находится в одномерной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками на третьем энергетическом уровне. Определить отношение плотностей вероятности обнаружения частицы в середине ямы и на расстоянии  $l/8$  от края ямы.



Дано:

$$x_1 = l/2$$

$$x_2 = l/8$$

$$n = 3$$

Найти:

$$\frac{|\psi(x_1)|^2}{|\psi(x_2)|^2} = ?$$

Решение:

а) Плотность вероятности обнаружения микрочастицы, находящейся на  $n$ -ом энергетическом уровне в потенциальной яме

$$|\psi(x)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{l} x\right). \quad (1)$$

б) Для координаты  $x_1$  выражение для плотности вероятности  $|\psi_n(x_1)|^2$  имеет вид:

$$|\psi(x_1)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{l} \cdot \frac{l}{2}\right) = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right). \quad (2)$$

в) Для координаты  $x_2$  плотность вероятности  $|\psi_n(x_2)|^2$  имеет вид:

$$|\psi(x_2)|^2 = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{l} \cdot \frac{l}{8}\right) = \frac{2}{l} \sin^2\left(\frac{n\pi}{8}\right). \quad (3)$$

г) Искомое отношение плотностей вероятности для  $n = 3$  равно

$$\frac{|\psi(x_1)|^2}{|\psi(x_2)|^2} = \frac{\sin^2\left(\frac{3\pi}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{3\pi}{8}\right)} = \frac{(-1)^2}{(0,92)^2} = \frac{1}{0,85} = 1,17.$$

Ответ: $\frac{ \psi(x_1) ^2}{ \psi(x_2) ^2} = 1,17.$
--

### 1.2.3. ПРИМЕРЫ ОТВЕТОВ НА ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

1. Для стационарных состояний квантовой системы характерно:

а) фиксирование момента времени;

б) отсутствие зависимости потенциальной функции от времени;

в) независимость полной волновой функции от времени;

г) определенное значение энергии системы;

д) независимость общего уравнения Шредингера, описывающего состояние системы, от времени.

1) а, б, в;

2) в, г, д;

3) б, в, д;

4) б, г, д.

*Решение:* Особенностью стационарных состояний является независимость полной волновой функции от времени. Это, в свою очередь, сле-

дует из решения стационарного уравнения Шрёдингера, в котором эффективный потенциал силового поля (потенциальная функция)  $U(x, y, z, t)$  не зависит от времени. Правильный вариант ответа: **3) б, в, д.**

2. В одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме на энергетических уровнях с  $n_1 = 5$  и  $n_2 = 1$  соответственно находятся две не взаимодействующие друг с другом частицы массами  $m_1$  и  $m_2$ . Энергии частиц в этих состояниях равны  $E_1 = E_2$ . При этом отношение масс  $\frac{m_2}{m_1}$  оказывается равным...

- 1) 0,2;                      2) 0,4;                      3) 0,8;  
 4) 0,02;                    5) 0,04;                    6) 0,08.

*Решение:* Формулы для расчёта собственных значений энергии (1.2.9) частицы на энергетических уровнях с  $n_1 = 5$  и  $n_2 = 1$ :

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_1 l^2} \cdot n_1^2, \quad \text{и} \quad E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_2 l^2} \cdot n_2^2.$$

По условию эти энергии равны. Следовательно,  $\frac{n_1^2}{m_1} = \frac{n_2^2}{m_2}$ . От-

сюда, отношение масс частиц равно:  $\frac{m_2}{m_1} = \frac{n_2^2}{n_1^2} = \frac{1}{25} = 0,04$ . Правиль-

ный вариант ответа: **5) 0,04.**

3. Микрочастица находится в потенциальной яме шириной  $l$  на третьем возбужденном уровне. Число полувольт на этом энергетическом уровне при увеличении ширины ямы в три раза будет...

- 1) 3;                              2) 6;                              3) 9;  
 4) 4;                              5) 8;                              6) 12.

*Решение:* Число полувольт  $N$ , укладываемых в ширину ямы не зависит от ширины ямы, а определяется только квантовым числом  $n$ , соответствующим порядковому номеру уровня:  $N = l / (\lambda/2) = n$ . Согласно условию задания: «микрочастица находится на **третьем возбуждённом уровне**». Основное состояние имеет порядковый номер  $n = 1$ ; первое возбуждённое состояние –  $n = 2$ ; и т.д. Третьему возбуждённому состоянию соответствует  $n = 4$ . Правильный вариант ответа: **4) 4.**

4. Волновая функция электрона в однородной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $l$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}.$$

Выберите из перечисленного ряда значений  $x$  те, при которых для  $n = 3$  вероятность нахождения электрона максимальна.

- а) 0;    б)  $l/6$ ;    в)  $l/4$ ;    г)  $l/3$ ;    д)  $l/2$ ;    е)  $2l/3$ ;    ж)  $5l/6$ .
- 1) а, в, д;                      2) б, г, ж;                      3) в, д, е;  
 4) а, г, ж;                      5) б, д, ж;                      6) б, г, е.

*Решение:* Из рисунка 1.2 б видно, что максимуму плотности вероятности, а, следовательно, и максимуму самой вероятности, соответствуют три значения координат  $x = l/6$  (середина левой трети ямы);  $l/2$  (центр ямы);  $5l/6$  (середина правой трети ямы). Правильный вариант ответа: **5) б, д, ж.**

5. Частица находится в потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками в определенном энергетическом состоянии  $E_n$  с квантовым числом  $n$ , а отношение собственных значений энергии  $E_{n+1} / E_{n-1} = 4$ . В этом случае квантовое число  $n$ , определяющее энергию  $E_n$  частицы, равно...

- 1) 1;                                      2) 2;                                      3) 3;  
 4) 4;                                      5) 5

*Решение:* Формулы для расчёта собственных значений энергии (1.2.9) частицы на энергетических уровнях  $(n + 1)$  и  $(n - 1)$ :

$$E_{n+1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \cdot (n + 1)^2, \text{ и } E_{n-1} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \cdot (n - 1)^2.$$

По условию, отношение этих энергий:

$$\frac{E_{n+1}}{E_{n-1}} = \left( \frac{n + 1}{n - 1} \right)^2 = 4.$$

Отсюда, решив последнее равенство, получим  $n = 3$ . Правильный вариант ответа: **3) 3.**

#### 1.2.4. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

В области пространства, где нет потенциальных ям, связанные стационарные состояния невозможны. В этом случае состояния частиц являются *нелокализованными*, а их энергия – *не дискретна* и может быть *любой*. Нелокализованное стационарное состояние характерно для моноэнергетических пучков частиц, например, для электронного пучка, вылетающего из электронной пушки.

##### ***Односторонний потенциальный барьер***

Если моноэнергетический пучок частиц попадает в тормозящее силовое поле, то кинетическая энергия частиц по мере их торможения уменьшается, а потенциальная – нарастает. Такое силовое поле называется *потенциальным барьером*. В области потенциального барьера микрочастицы проявляют свои волновые свойства:

1) При замедлении частиц уменьшается их скорость и импульс, что приводит к увеличению их дебройлевской длины волны.

До барьера кинетическая энергия частиц равна  $E$ , импульс равен  $p_1 = \sqrt{2mE}$ , а длина волны де Бройля равна

$$\lambda_1 = \frac{h}{p_1} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}. \quad (1.2.13)$$

За барьером кинетическая энергия частиц уменьшается до  $(E - U_0)$ , импульс становится равным  $p_2 = \sqrt{2m(E - U)}$  и длина волны де Бройля увеличивается до значения

$$\lambda_2 = \frac{h}{p_2} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - U_0)}}. \quad (1.2.14)$$

Уменьшение скорости волны означает в оптике увеличение показателя преломления среды. Поэтому, *потенциальный барьер можно тоже рассматривать как границу между двумя средами с разными показателями преломления*. Показатель преломления волн де Бройля в области потенциального барьера можно определить как отношение скорости частиц до барьера  $v_1$  к скорости частиц за барьером  $v_2$ .

$$n = \frac{v_1}{v_2} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}. \quad (1.2.15)$$

2) Пучок частиц в области потенциального барьера частично отражается от барьера. Для классических частиц с энергией  $E > U_0$  этого не может быть, каждая частица просто несколько затормозится в поле

барьера, а за барьером будет двигаться в прежнем направлении с меньшей скоростью. Коэффициент отражения пучка  $R$  и коэффициент прохождения  $D$  зависят от формы барьера. На рисунке 1.3 изображён односторонний потенциальный барьер простейшей формы – прямоугольный ступенчатый барьер.

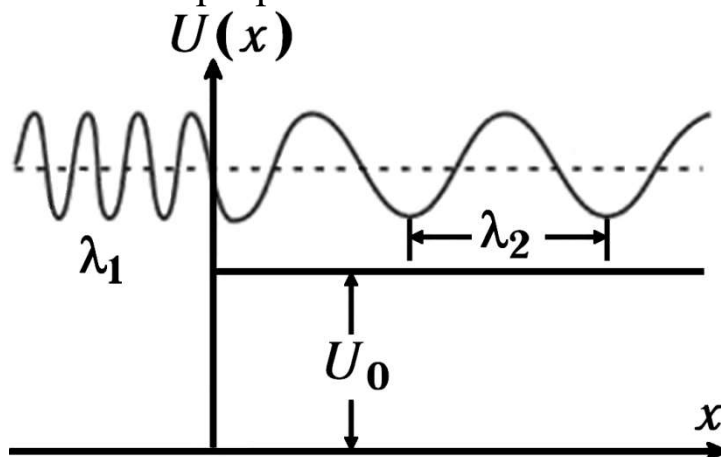


Рисунок 1.3 – Прямоугольный односторонний потенциальный барьер

Для прямоугольного потенциального барьера коэффициенты отражения  $R$  и прохождения  $D$  выражаются следующими формулами:

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad D = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad (1.2.16)$$

Волновые числа для волн де Бройля, соответствующих движущейся частице в области 1 (до барьера) и 2 (над барьером):

$$k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad k_2 = \frac{2\pi}{\lambda_2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}. \quad (1.2.17)$$

### **Двусторонний потенциальный барьер**

Простейшим видом двустороннего потенциального барьера является прямоугольный барьер, изображённый на рисунке 1.4.

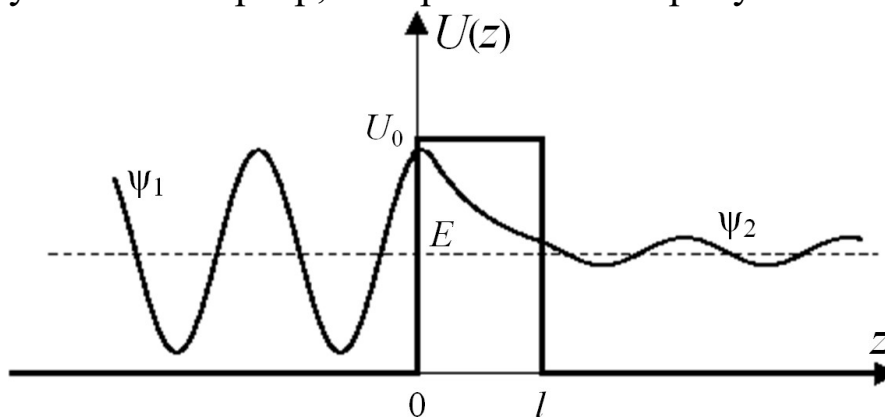


Рисунок 1.4 – Прямоугольный двусторонний потенциальный барьер

Поле двустороннего потенциального барьера является тормозящим независимо от того, с какой стороны в него влетают частицы. У двустороннего барьера есть высота  $U_0$  и ширина  $l$ .

Особенность поведения частиц в поле двустороннего потенциального барьера состоит в том, что они, даже при условии, что их энергия  $E$  меньше высоты барьера ( $E < U_0$ ), могут с некоторой вероятностью проникать через барьер.

С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при  $E < U_0$  невозможно, т.к. частица, находясь в области барьера, должна была бы обладать отрицательной кинетической энергией.

**Туннельный эффект является специфическим квантовым эффектом.**

Вероятность проникновения частицы через двусторонний барьер называется **коэффициентом прозрачности  $D$**  барьера (или **коэффициентом прохождения**). В случае прямоугольного двустороннего барьера коэффициент прозрачности может быть вычислен по формуле:

$$D = e^{-\frac{2l}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}. \quad (1.2.18)$$

Итак, микрочастицы, попадая в поле двустороннего потенциального барьера, высота которого больше кинетической энергии частиц, могут с некоторой вероятностью проникать через классически недоступную область, как бы пробивая в ней туннель. Это явление называется **туннельным эффектом**.

### 1.2.5. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Электрон с энергией 100 эВ попадает на потенциальный барьер высотой 64 эВ. Определить вероятность того, что электрон отразится от барьера.

Дано:  
 $E = 100$  эВ,  
 $U_0 = 64$  эВ  
Найти:  
 $R = ?$

Решение:  
 Определить вероятность того, что электрон отразится от барьера – значит найти коэффициент отражения электрона от барьера  $R$ . Согласно формуле (1.2.16):

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2. \quad (1)$$

Формула (1) может быть приведена к виду

$$R = \left( \frac{\sqrt{E - U_0} - \sqrt{E}}{\sqrt{E - U_0} + \sqrt{E}} \right)^2.$$

При числовых расчётах необходимо энергию выразить в Джоулях, для чего электронвольты умножаем на заряд электрона ( $1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл).

$$R = \left( \frac{\sqrt{(100 - 64) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} - \sqrt{100 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}}{\sqrt{(100 - 64) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} + \sqrt{100 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \right)^2 =$$

$$= \left( \frac{6 - 10}{6 + 10} \right)^2 = (0,25)^2 = 0,0625.$$

Ответ:  $R = 0,0625$ .

*Примечание:* Таким образом, несмотря на то обстоятельство, что энергия электрона в 1,5 раза превышает энергию потенциального барьера, имеется вероятность того, что электрон отразится (проявляются волновые свойства микрочастиц).

2. Электрон с энергией 4 эВ движется в положительном направлении оси  $x$ , встречая на своём пути прямоугольный потенциальный барьер высотой 10 эВ и шириной 0,1 нм. Определить коэффициент прозрачности барьера.

Дано:

$$E = 4 \text{ эВ} = 6,4 \cdot 10^{-19} \text{ Дж},$$

$$U_0 = 10 \text{ эВ} = 16 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

$$l = 0,1 \text{ нм} = 10^{-10} \text{ м}$$

Найти:

$$D = ?$$

Решение:

а) Коэффициент прозрачности барьера можно определить по формуле (1.2.18):

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

б) Подстановка числовых данных даёт

$$D = \exp\left(-\frac{2 \cdot 10^{-10}}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} (16 - 6,4) \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}\right) = 0,1.$$

Ответ:  $D = 0,1$ .

3. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину 0,1 нм. Определить в электрон-вольтах разность энергий ( $U_0 - E$ ), при которой вероятность прохождения электрона сквозь барьер составит 0,5.

Дано:  
 $l = 0,1 \text{ нм} = 10^{-10} \text{ м}$   
 $D = 0,5$   
 $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$   
Найти:  
 $(U_0 - E) = ?$

Решение:  
 а) Коэффициент прозрачности барьера определим по формуле (1.2.18)

$$D = \exp\left(-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right). \quad (1)$$

б) Преобразуем формулу (1), взяв натуральный логарифм от левой и правой частей:

$$\ln D = -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (2)$$

в) Из выражения (2) найдём искомое неизвестное  $(U_0 - E)$

$$U_0 - E = \frac{(-\ln D \cdot \hbar)^2}{(2l)^2 \cdot 2m}.$$

г) После подстановки числовых данных имеем:

$$U_0 - E = \frac{(0,693 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34})^2}{(2 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} = 0,728 \cdot 10^{-19} \text{ Äæ}.$$

По условию задачи ответ необходимо дать в электрон-вольтах. Разделив полученное значение на заряд электрона, получим искомую величину:

$$U_0 - E = 0,728 \cdot 10^{-19} / 1,6 \cdot 10^{-19} = 0,455 \text{ эВ}.$$

**Ответ:**  $U_0 - E = 0,455 \text{ эВ}.$

4. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину 0,1 нм. Разность между высотой потенциального барьера и энергией движущегося в положительном направлении оси  $x$  электрона  $(U_0 - E) = 5 \text{ эВ}$ . Определить, во сколько раз изменится коэффициент прозрачности потенциального барьера для электрона, если разность  $(U_0 - E)$  возрастёт в 4 раза.

Дано:  
 $l = 0,1 \text{ нм} = 10^{-10} \text{ м}$   
 $(U_0 - E) = 5 \text{ эВ} = 8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$   
 $(U_0 - E)_2 / (U_0 - E)_1 = 4$   
Найти:  
 $D_2 / D_1 = ?$

Решение:  
 а) Воспользуемся выражением для коэффициента прозрачности барьера (1.2.18) и найдём отношение  $D_2 / D_1$ :

$$\frac{D_2}{D_1} = e^{-\frac{2l\sqrt{2m}}{\hbar} (\sqrt{(U_0 - E)_2} - \sqrt{(U_0 - E)_1})}.$$

б) Преобразуем выражение



$$\frac{D_2}{D_1} = e^{-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)_1} \left( \sqrt{\frac{(U_0 - E)_2}{(U_0 - E)_1}} - 1 \right)}$$

в) Используя условие задачи  $\frac{(U_0 - E)_2}{(U_0 - E)_1} = 4$ , получим окончательное выражение для определения отношения  $D_2 / D_1$ :

$$\frac{D_2}{D_1} = e^{-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)_1}}$$

г) Подставим числовые данные

$$\frac{D_2}{D_1} = \exp\left(-\frac{2 \cdot 10^{-10}}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} (8 \cdot 10^{-19})}\right) = e^{-2,3} = 0,1.$$

Ответ:  $D_2 / D_1 = 0,1$ , т.е. уменьшится в 10 раз.

5. Частица массой  $10^{-19}$  кг, двигаясь в положительном направлении оси  $x$  со скоростью 120 м/с, встречает на своём пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой 100 эВ. Определить коэффициент отражения волн де Бройля на границе потенциального барьера.

Дано:

$$m = 10^{-19} \text{ кг}$$

$$v = 20 \text{ м/с}$$

$$U_0 = 100 \text{ эВ} =$$

$$= 1,6 \cdot 10^{-17} \text{ Дж}$$

Найти:

$$R = ?$$

Решение:

а) Коэффициент отражения волн де Бройля на границе потенциального барьера может быть рассчитан по формуле (1.2.16):

$$R = \left[ \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right]^2. \quad (1)$$

б) Подставив значения коэффициентов  $k_1$  и  $k_2$

$$(1.2.17): \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}; \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)},$$

формулу (1) можно представить в виде 
$$R = \left[ \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right]^2.$$

в) Потенциальная энергия барьера (высота барьера)  $U_0$  известна, кинетическую энергию частицы определим по известной формуле

$$E = \frac{mv^2}{2}.$$

г) Найдем значение кинетической энергии в электрон-вольтах

$$E = \frac{10^{-19} \cdot 20^2}{2 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 125 \text{ эВ.}$$

д) Теперь можно определить численное значение коэффициента отражения частицы от потенциального барьера

$$R = \left[ \frac{1,6 \cdot 10^{-19} (\sqrt{125} - \sqrt{25})}{1,6 \cdot 10^{-19} (\sqrt{125} + \sqrt{25})} \right]^2 = [0,382]^2 = 0,146.$$

Ответ:  $R = 0,146$ .

### 1.2.6. ПРИМЕРЫ ОТВЕТОВ НА ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

1. Что произойдет с длиной волны де Бройля микрочастицы с энергией  $E$ , когда она налетит на потенциальный барьер высотой  $U_0 = E/2$ ?

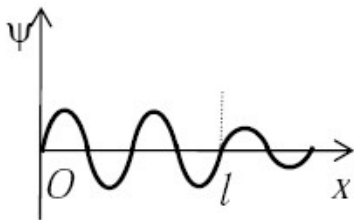
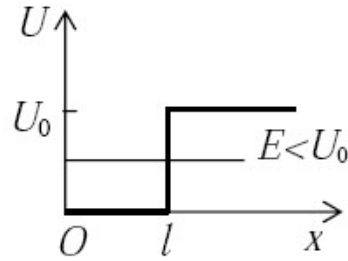
- |                                 |                                 |
|---------------------------------|---------------------------------|
| 1) увеличится в 2 раза;         | 2) уменьшится в 2 раза;         |
| 3) увеличится в $\sqrt{2}$ раз; | 4) уменьшится в $\sqrt{2}$ раз; |
| 5) увеличится в 4 раза;         | 6) уменьшится в 4 раза.         |

*Решение:* Границу потенциального барьера можно рассматривать как границу между двумя средами с разными показателями преломления. Относительный показатель преломления на границе потенциального барьера определяется по формуле (1.2.15). Согласно формулам (1.2.13) и (1.2.14) длины волн де Бройля зависят от кинетической энергии частицы. Следовательно, отношение длин волн де Бройля будет равно:

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{\sqrt{E}}{\sqrt{(E - U_0)}} = \frac{\sqrt{E}}{\sqrt{(E - E/2)}} = \sqrt{2}.$$

Т.е. длина волны де Бройля увеличится в  $\sqrt{2}$  раз. Правильный вариант ответа: **3) увеличится в  $\sqrt{2}$  раз.**

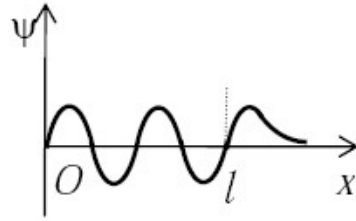
2. Частица с полной энергией  $E < U_0$  движется в одномерном потенциальном поле  $U(x)$ , изображенном на рисунке. Какой из приведенных ниже графиков правильно описывает характер изменения волновой функции  $\psi(x)$ ?



а)

1) а;

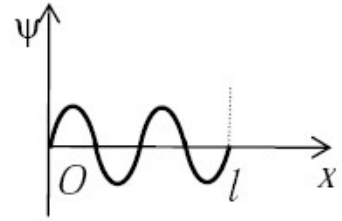
3) в;



б)

2) б;

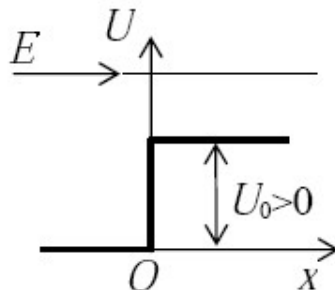
4) правильного графика нет.



в)

*Решение:* При прохождении через потенциальный барьер ширины  $l$ , высота которого больше кинетической энергии  $E$  налетающей частицы, коэффициент прозрачности  $D$  барьера (коэффициент прохождения) определяется формулой (1.2.18) и определяет вероятность того, что частица окажется в области за барьером. Из формулы (1.2.18) видно, что вероятность прохождения частицы убывает с ростом ширины потенциального барьера  $l$ . Т.к. ширина потенциального барьера  $l$  стремится к бесконечности, то коэффициент прозрачности стремится к нулю. Следовательно, вероятность обнаружения частицы в области потенциального барьера равна нулю. Т.к. за вероятность обнаружения частицы в некоторой области пространства отвечает плотность вероятности  $|\psi(x)|^2$ , то амплитуда волны де Бройля в области потенциального барьера тоже равна нулю. Правильный вариант ответа: **3) в**.

3. Частица с полной энергией  $E > U_0$  налетает на одномерный потенциальный барьер  $U(x)$ , изображенный на рисунке.



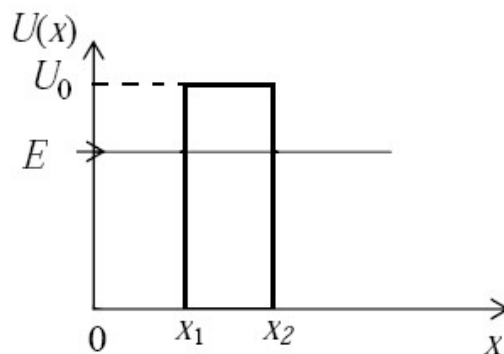
Для рассматриваемого случая коэффициент прохождения  $D$  будет определяться выражением ...

- 1)  $\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ ;                      2)  $\left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$ ;
- 3)  $\frac{2k_1k_2}{k_1 + k_2}$ ;                      4)  $\frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$ .

*Решение:* При прохождении через потенциальную ступень (односторонний барьер), высота которого меньше кинетической энергии  $E$  налетающей частицы, коэффициент прозрачности  $D$  барьера (коэффициент прохождения) определяется формулой (1.2.16)  $D = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$ .

Правильный вариант ответа: **4)**  $\frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$ .

4. Коэффициент прохождения  $D$  потенциального барьера, изображённого на рисунке, равен ...

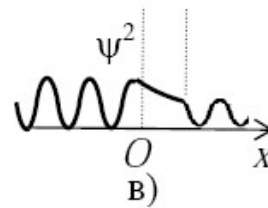
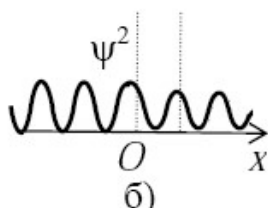
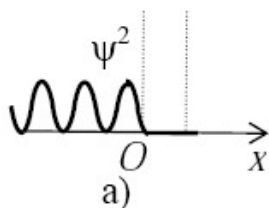
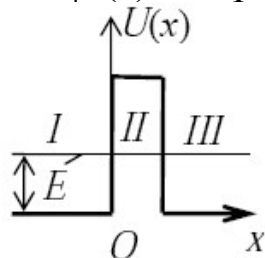


- 1) 0;                      2)  $e^{-\frac{2}{\hbar}(x_2-x_1)\sqrt{2mE}}$ ;
- 3)  $e^{-\frac{2}{\hbar}(x_2-x_1)\sqrt{2m(U_0-E)}}$ ;                      4)  $e^{-\frac{2}{\hbar}(x_2-x_1)\sqrt{2mU_0}}$ .

*Решение:* При прохождении через потенциальный барьер конечной ширины  $l$ , высота которого больше кинетической энергии  $E$  налетающей частицы, коэффициент прозрачности  $D$  барьера (коэффициент прохождения) определяется формулой (1.2.18) и определяет вероятность того, что частица окажется в области правее потенциального барьера. Из формулы (1.2.18) видно, что вероятность прохождения отлична от нуля и убывает с ростом массы частицы  $m$ , ширины потенциального барьера  $l$  и разности  $(U_0 - E)$ . Правильный вариант ответа:

**3)**  $e^{-\frac{2}{\hbar}(x_2-x_1)\sqrt{2m(U_0-E)}}$ .

5. Частица с полной энергией  $E$  налетает на потенциальный барьер  $U(x)$ , изображенный на рисунке. Что произойдет с частицей? Какой из приведённых ниже графиков правильно отображает распределение плотности вероятности  $\psi^2(x)$  для рассматриваемого случая?



г) частица отразится от потенциального барьера и не пройдет в области II и III;

д) частица беспрепятственно пройдет над потенциальным барьером и попадет в область III;

е) вероятность обнаружения частицы во всех областях отлична от нуля.

1) а, г;

2) б, д;

3) б, е;

4) в, д;

5) в, е.

**Решение:** При прохождении через потенциальный барьер конечной ширины  $l$ , высота которого больше кинетической энергии  $E$  налетающей частицы, коэффициент прозрачности  $D$  барьера (коэффициент прохождения) определяется формулой (1.2.18) и определяет вероятность того, что частица окажется в области III. Из формулы (1.2.18) видно, что вероятность прохождения отлична от нуля и убывает с ростом массы частицы  $m$ , ширины потенциального барьера  $l$  и разности  $(U_0 - E)$ . Т.к. за вероятность обнаружения частицы в некоторой области пространства отвечает плотность вероятности  $|\psi(x)|^2$ , то амплитуда волны де Бройля в области III должна быть меньше, чем амплитуда в области I. Вероятности обнаружения частицы в области I и III отличны от нуля. Внутри потенциального барьера (в области II) вероятность обнаружения частицы спадает по экспоненциальному закону с глубиной проникновения в потенциальный барьер. Правильный вариант ответа: **5) в, е.**

## ГЛАВА 3. АТОМ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

### 1.3.1. АТОМ ВОДОРОДА. КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

Волновая функция электрона в атоме водорода определяется четырьмя квантовыми числами  $n, l, m, s$ :

**Главное квантовое число  $n$**  принимает целые значения ( $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) и определяет энергию электрона, размер (радиус) электронной орбитали (расстояние электрона от ядра), т.е. области пространства, в которой находится электрон.

**Орбитальное квантовое число  $l$**  принимает целые значения  $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$ . Оно определяет форму орбитали и момент количества движения электрона при вращении его вокруг ядра.

**Магнитное квантовое число  $m$**  принимает целые значения зависящие от  $l$  значения ( $m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots; \pm l$ ). Оно определяет проекцию орбитального магнитного момента электронов на направление внешнего магнитного поля (помогает классифицировать орбитали по их ориентации в пространстве).

**Спиновое квантовое число  $s$**  имеет значение  $1/2$  и является мерой собственного момента импульса электрона.

Квантовые числа  $l$  и  $m$  характеризуют квадрат момента импульса  $L^2$  электрона и его проекцию  $L_z$  на ось  $Z$ . Условия квантования для  $L^2$  и  $L_z$  имеют вид:

$$L^2 = l(l + 1)\hbar^2; \quad L_z = m\hbar. \quad (1.3.1)$$

Состояния электрона в атоме, характеризуемые квантовыми числами  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ , соответственно называются  $s, p, d, f$  и т. д.

Электрон обладает электрическим зарядом, его можно характеризовать модулем орбитального магнитного момента  $\mu$  и его проекцией  $\mu_z$  на ось  $Z$ , которые принимают дискретные значения:

$$\mu = -\mu_B \sqrt{l(l + 1)}, \quad \mu_z = -m\mu_B, \quad (1.3.2)$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,27 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл – универсальная постоянная, называемая

магнетоном Бора. Знак « $-$ » указывает, что механический  $\vec{L}$  и магнитный  $\vec{\mu}$  моменты имеют противоположные направления.

Собственный момент импульса (спин)  $L_s$  электрона и его проекция на ось  $Z$   $L_{sz}$  принимают значения:

$$L_s = \sqrt{s(s + 1)}\hbar, \quad L_{sz} = \pm m_s \hbar, \quad (1.3.3)$$

где  $s = 1/2$  – спиновое квантовое число для электрона, а  $m_s = \pm 1/2$ .

Собственный магнитный момент  $\mu_s$  электрона и его проекция  $\mu_{sz}$  квантуются по законам:

$$\mu_s = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)}, \quad \mu_{sz} = \pm \mu_B. \quad (1.3.4)$$

Величина полного момента импульса электрона  $L_j$  определяется внутренним квантовым числом  $j$ , величина которого принимает дискретные значения:

$$L_j = \hbar \sqrt{j(j+1)}, \quad (1.3.5)$$

где  $j$  для электрона в атоме водорода имеет два значения:  $j = l + s$ ,  $|l - s|$ . При  $l = 0$  квантовое число  $j$  имеет только одно значение  $j = s = 1/2$ .

Проекция полного механического момента электрона на направление внешнего магнитного поля принимает значения

$$L_j = m_j \hbar, \quad (1.3.6)$$

где  $m_j = 0, \pm 1, \dots, \pm j$ . Правило отбора по квантовому числу  $j$  имеет вид  $\Delta j = \pm 1, 0$ . Состояния с различным  $j$  обладают различной энергией в связи с наличием спин – орбитального взаимодействия.

Главное квантовое число  $n$  определяет энергию электрона в водородоподобном атоме:

$$E_n = -Z^2 e^4 m_e / 8\varepsilon_0^2 h^2 n^2, \quad (1.3.7)$$

где  $Ze$  – заряд атома,  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг – масса электрона,  $\varepsilon_0 = 8,86 \cdot 10^{-12}$  Ф/м – электрическая постоянная. Формула записана в СИ. Энергия определяется в Дж. Для электрона в атоме водорода  $Z = 1$ , тогда в электрон-вольтах его энергия определится по формуле:

$$E_n = -13,6/n^2 \text{ эВ}. \quad (1.3.8)$$

Для водородоподобных атомов с  $Z \neq 1$  энергия в электрон-вольтах равна:

$$E_n = -Z^2 \cdot 13,6/n^2 \text{ эВ}. \quad (1.3.9)$$

Состояния с одинаковой энергией, отличающиеся значениями квантовых чисел  $l, m$ , называются **вырожденными**, а число состояний, соответствующее одному и тому же значению энергии, называется **кратностью вырождения**, которая равна  $2n^2$ .

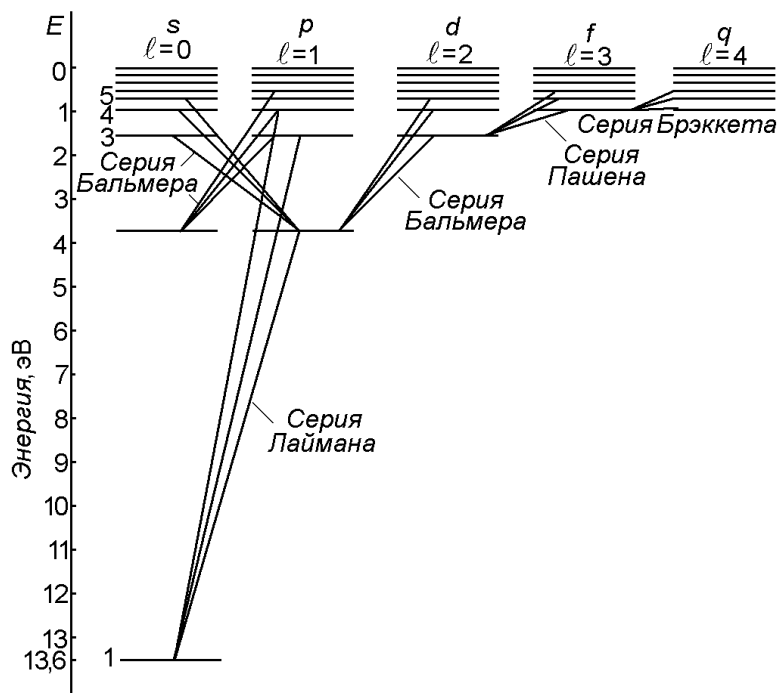


Рисунок 1.5 – Схема энергетических уровней для электрона в атоме водорода

Схема энергетических уровней для электрона в атоме водорода приводится на рис. 1.5. На схеме отражено вырождение уровней. Поглощение и испускание света происходит квантами энергии  $\hbar\omega$ . При переходе электрона с одного уровня на другой испускается квант энергии:  $\hbar\omega = E_{n_j} - E_{n_i}$ , где  $n_j, n_i$  – квантовые числа этих уровней. Для орбитального квантового числа  $l$  существует правило отбора  $\Delta l = \pm 1$ , т.е. возможны лишь такие переходы, при которых  $l$  изменяется на  $\pm 1$ .

На схеме (рис. 1.5) изображены переходы, соответствующие основным сериям в спектре атома водорода:

серии Лаймана  $n_i = 1, n_j = 2, 3, 4, \dots$

серии Бальмера  $n_i = 2; n_j = 3, 4, 5, \dots$

серии Пашена  $n_i = 3; n_j = 4, 5, 6, \dots$

серии Брэккета  $n_i = 4; n_j = 5, 6, 7, \dots$  и т. д.



### 1.3.2. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

Наиболее простыми оказываются спектры элементов первой группы таблицы Менделеева, у которых на внешней оболочке атома находится один электрон.

В атомной физике принимаются условные обозначения состояний атома с различными моментами импульса. Эти обозначения носят название «*Спектральные термы атомов*». Состояния атомов обозначаются в зависимости от величины орбитального квантового числа атома  $L = 0, 1, 2, 3$ , символами  $S, P, D, F$  и т. д. Причем справа внизу у символа указывается значение квантового числа  $J$  атома, слева сверху – мультиплетность состояния, равная  $2S + 1$ .

*Терм атома* записывается следующим образом:

$$^{2S+1}L_J, \quad (1.3.10)$$

где  $S$  – результирующее спиновое квантовое число,  $L$  – результирующее орбитальное квантовое число.

В водородоподобных атомах испускание (поглощение) света связано с изменением движения одного электрона и именно его состояние определяет состояние атома в целом.

Например, при  $L = 1, S = 1/2, J = 1/2$  состояние атома водорода запишется в виде  $^2P_{1/2}$ .

Спектральные термы атомов щелочных металлов, у которых на последнем (валентном) уровне находится всего один электрон, выражаются формулой:

$$T_{n,l} = \frac{R}{(n + \sigma)^2}, \quad (1.3.11)$$

а энергия электрона определится формулой:

$$E_{n,l} = \frac{-R\hbar}{(n + \sigma)^2}, \quad (1.3.12)$$

где  $R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$  – постоянная Ридберга,  $n$  – главное квантовое число,  $\sigma$  – поправка, зависящая от орбитального квантового числа  $l$ .

В ионах щелочных металлов реализуются не все возможные электронные переходы, а лишь разрешенные, которые удовлетворяют правилу отбора  $\Delta l = \pm 1$ , где  $\Delta l$  – разность значений орбитальных квантовых чисел, соответствующих двум состояниям валентного электрона.

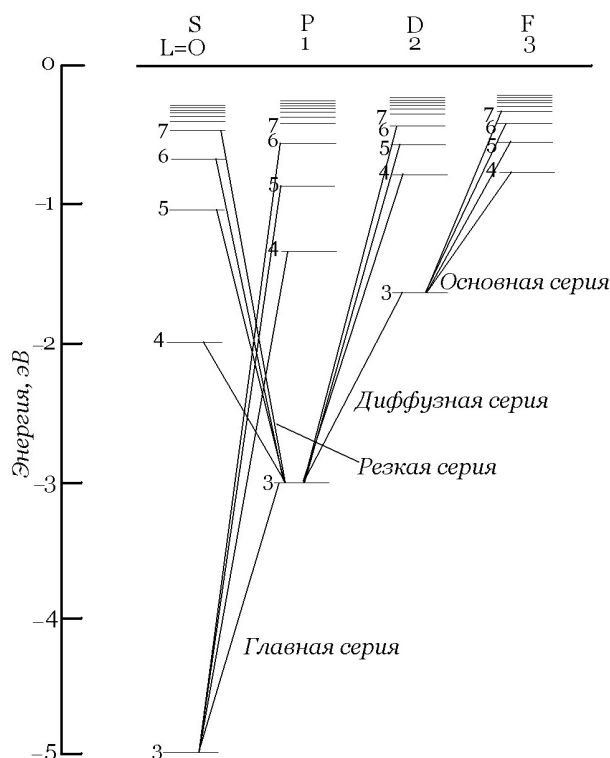


Рисунок 1.6 – Спектры излучения щелочных металлов

В спектрах испускания щелочных металлов (рис. 1.6) наблюдается главная серия, которая возникает при переходах валентного электрона из различных возбуждённых  $p$ -состояний в основное, невозбуждённое  $s$ -состояние. При переходе электрона в  $s$ -состояние из ближайшего  $p$ -состояния спектральная линия главной серии имеет максимальную интенсивность. Например, для  $Na$  эта линия соответствует переходу  $3p \rightarrow 3s$ , (рис. 1.6) для всех линий главной серии:

$$\omega = \frac{R}{(3 + \sigma_s)^2} - \frac{R}{(m + \sigma_p)^2}, \quad (1.3.13)$$

где  $m = 2, 3, 4, \dots$ . Здесь  $\sigma_s$  и  $\sigma_p$  – ридберговские поправки, соответствующие конечному  $s$  и начальному  $p$  состояниям электрона.

Кроме главной серии (наблюдаемой и при излучении, и при поглощении) наблюдаются еще резкая, диффузная и основная серии. Резкая серия имеет резкие линии, диффузная – размытые.

Расщепление спектральных линий в отсутствие внешних полей обусловлено расщеплением энергетических уровней и связано с наличием у электрона спина.

Момент импульса атомного остатка атома щелочного металла равен нулю, и полный момент импульса  $L_j$  атома равен моменту валентного электрона, т.е. векторной сумме его орбитального и спинового моментов импульса:

$$L_j = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad (1.3.14)$$

где  $j = l - s; \dots j = l + s$  – квантовое число полного момента импульса электрона. Правило отбора для квантового числа  $j$ :  $\Delta j = 0; \pm 1$ .

Расстояние между уровнями, связанное со спин-орбитальным взаимодействием, равно  $\Delta E = \alpha^2 E_i / 16$ , где  $E_i$  – энергия ионизации водородоподобного атома,  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1 / 137$ .

Каждый электрон в атоме обладает орбитальным моментом импульса  $\vec{L}_l$  и собственным (спиновым) моментом импульса  $\vec{L}_s$ . Механические моменты связаны с соответствующими магнитными моментами, вследствие чего между всеми  $\vec{L}_l$  и  $\vec{L}_s$  имеется взаимодействие. Моменты  $\vec{L}_l$  и  $\vec{L}_s$  складываются в результирующий (полный) механический момент атома  $\vec{L}_J$ . Квантовое число  $J$  результирующего момента  $L_J$  может иметь одно из следующих значений:  $J = L + S; L + S - 1; \dots; |L - S|$ .  $J$  будет целым если  $S$  – целое (т. е. при четном числе электронов в атоме). Энергия атома зависит как от взаимной ориентации моментов  $\vec{L}_L$  (т.е. от квантового числа  $L$ ), от взаимной ориентации моментов  $\vec{L}_S$  (от квантового числа  $S$ ), так и от взаимной ориентации моментов  $\vec{L}_L$  и  $\vec{L}_S$  (от квантового числа  $J$ ).

Гиромагнитное отношение для орбитальных моментов атома:

$$\mu_L = -\frac{e}{2m_e} L_L = -\mu_B \sqrt{L(L+1)}, \quad (1.3.15)$$

где  $\mu_B = -\frac{e\hbar}{2m_e} = 0,927 \cdot 10^{-23}$  А · м<sup>2</sup> – магнетон Бора. Минус в формуле означает, что магнитный и механический моменты направлены противоположно (т.к. заряд электрона отрицательный). Проекция  $\vec{\mu}_L$  на направление  $OZ$  равна:  $\mu_{Lz} = -\mu_B m_L$ . При  $m_L > 0$  проекция  $\vec{\mu}_L$  отрицательна, а при  $m_L < 0$  – положительна.

Гиромагнитное отношение собственных (спиновых) моментов в два раза больше гиромагнитного отношения орбитальных моментов:

$$\mu_S = -\frac{e}{m_e} L_S = -2\mu_B \sqrt{S(S+1)}, \quad (1.3.16)$$

– спин обладает удвоенным магнетизмом. Вследствие этого гиромагнитное отношение полных моментов  $\mu_J$  и  $L_J$  является функцией квантовых чисел  $L, S, J$ :

$$\mu_J = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}, \quad (1.3.17)$$

где  $g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$  – множитель (фактор) Ланде.

Проекция магнитного момента атома на направление  $OZ$ :

$$\mu_{Jz} = -\mu_B g m_J; \quad m_J = J, J-1, \dots, -J. \quad (1.3.18)$$

При построении векторной модели механические и магнитные моменты атома изображаются в виде направленных отрезков. Строго говоря, вследствие неопределенности направлений векторов  $\vec{L}$  в пространстве такой приём не является правомерным. Поэтому такая модель условна (рис. 1.7).

Проекция вектора  $\vec{\mu}_J$  на направление  $\vec{L}_J$  равна (рис. 1.7):

$$\begin{aligned} \mu_J &= -|\vec{\mu}_L| \cos \alpha - |\vec{\mu}_S| \cos \beta, \\ \cos \alpha &= \frac{L_J^2 + L_L^2 - L_S^2}{2L_J L_L} = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)} \cdot \sqrt{L(L+1)}}, \\ \cos \beta &= \frac{L_J^2 + L_S^2 - L_L^2}{2L_J L_S} = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1)} \cdot \sqrt{S(S+1)}}, \end{aligned}$$

тогда

$$\mu_J = -\mu_B \sqrt{J(J+1)} \cdot \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (1.3.19)$$

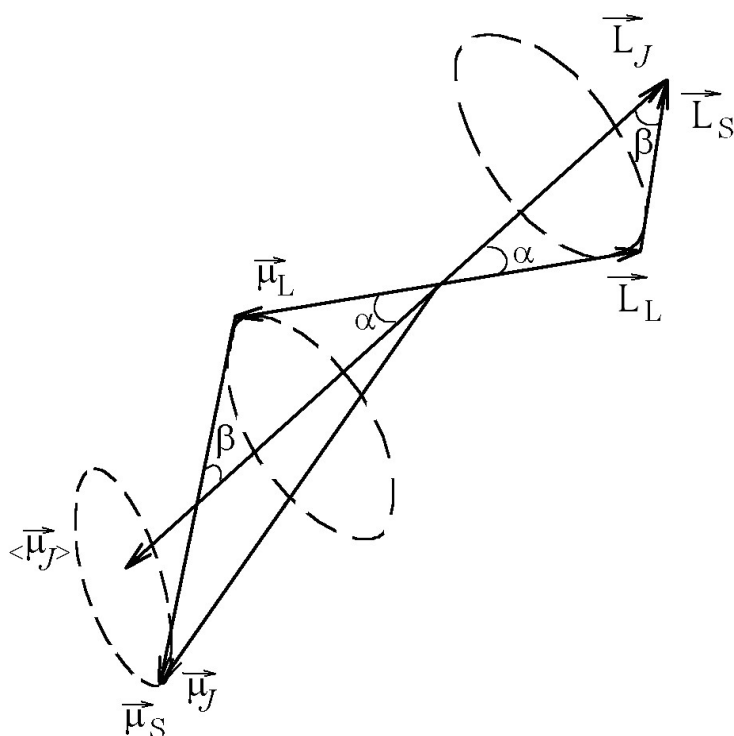


Рисунок 1.7 – Векторная модель механических и магнитных моментов атома

Заполнение электронами энергетических состояний в многоэлектронных атомах происходит в соответствии с принципом Паули, который разрешает лишь такие термы, для которых значения хотя бы одного из квантовых чисел  $m_l$  и  $m_s$  эквивалентных электронов (т.е. электронов с одинаковыми  $n$  и  $l$ ) не совпадают. При этом выполняются два эмпирических правила Хунда:

1) из термов, принадлежащих данной электронной конфигурации, наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при таком  $S$  значении  $L$ ;

2) мультиплеты, образованные эквивалентными электронами, являются правильными (это значит, что с увеличением  $J$  возрастает энергия состояния), если заполнено не более половины подоболочки, и обращенными (с увеличением  $J$  энергия убывает), если заполнено больше половины подоболочки.

Из второго правила Хунда следует, что в случае, когда заполнено не более половины подоболочки, наименьшей энергией обладает компонент мультиплета с  $J = L + S$ .

### 1.3.3 ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Чему равны энергия и квадрат орбитального момента импульса  $L^2$  электрона в состояниях а)  $2p$ , б)  $4f$ ? Чему равна проекция орбитального момента на ось  $OZ$  в каждом из состояний.

Дано:

$$2p (n = 2, l = 1)$$

$$4f (n = 4, l = 3)$$

$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

Найти:

$$E_n - ? \quad L^2 - ? \quad L_z - ?$$

Решение:

Квантовое состояние электрона в атоме водорода задается главным квантовым числом  $n$ , которое определяет энергию электрона в атоме водорода

$$E_n = -e^4 m_e / (8 \epsilon_0^2 h^2 n^2);$$

орбитальным квантовым числом  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ , которое определяет квадрат

орбитального момента импульса электрона:  $L^2 = l(l + 1)\hbar^2$ ;

и магнитным квантовым числом  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ , которое определяет проекцию момента импульса на направление  $Z$ :  $L_z = m\hbar$ , где  $m = 0, \pm 1, \pm \dots, \pm l$ .

В задаче заданы квантовые числа  $n, l, m$ . Следует найти величины  $E_n, L^2, L_z$ .

Рассмотрим случай а) Обозначение  $2p$  соответствует состоянию с  $n = 2, l = 1$ . Состоянию  $l = 1$  могут соответствовать квантовые состояния с различными магнитными квантовыми числами  $m = 0, \pm 1$ . Энергия в возбужденном состоянии  $n = 2$  для электрона в атоме водорода может быть рассчитана в СИ по формуле:

$$E_2 = -e^4 m_e / (8 \epsilon_0^2 h^2 n^2),$$

а в эВ энергия равна

$$E_2 = -e^3 m_e / (8 \epsilon_0^2 h^2 n^2) = \frac{- (1,6 \cdot 10^{-19})^3 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}{(8 \cdot 8,6 \cdot 10^{-12})^2 (6,62 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 4} = -13,6/4 \text{ эВ} = -3,4 \text{ эВ}.$$

Знак «минус» означает, что электрон связан в атоме с ядром.

Квадрат момента импульса определяется орбитальным квантовым числом  $l = 1$ :  $L^2 = 1(1 + 1)\hbar^2 = 2\hbar^2$ ,  $L = \sqrt{2}\hbar$ .

Подставим численные значения:

$$L^2 = 2 \cdot (6,62/2 \cdot 3,14)^2 \cdot 10^{-68} = 2,22 \cdot 10^{-68} \text{ (Дж} \cdot \text{с)}^2;$$

$$L = 1,41 \cdot \hbar = 1,49 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}.$$

Проекция на ось  $OZ$  определяется из условия  $L_z = m\hbar$ , где  $m = 0, \pm 1$ , т.е. имеет три значения:  $L_z = 0, L_z = \hbar, L_z = -\hbar$ .

После подстановки численных значений, запишем  $L_z = 0; 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}; -1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$ .

Момент импульса является вектором. Однако вследствие волновых свойств электрона одновременно все три его проекции  $L_x, L_y, L_z$  заданы быть не могут. Вполне определённое значение имеет лишь модуль вектора  $|\vec{L}|$  и одна из его проекций  $L_z$ , которую мы определили. Квантовое число  $m$  характеризует ориентацию момента импульса в пространстве. Различные ориентации вектора  $\vec{L}$  для данного случая показаны на рис. 1.9 а. Вектор  $\vec{L}$  для различных значений  $m$  при заданном  $l$  изображен стрелками. Его положение в пространстве квантуется:  $\cos \alpha = m/\sqrt{l(l+1)}$ .

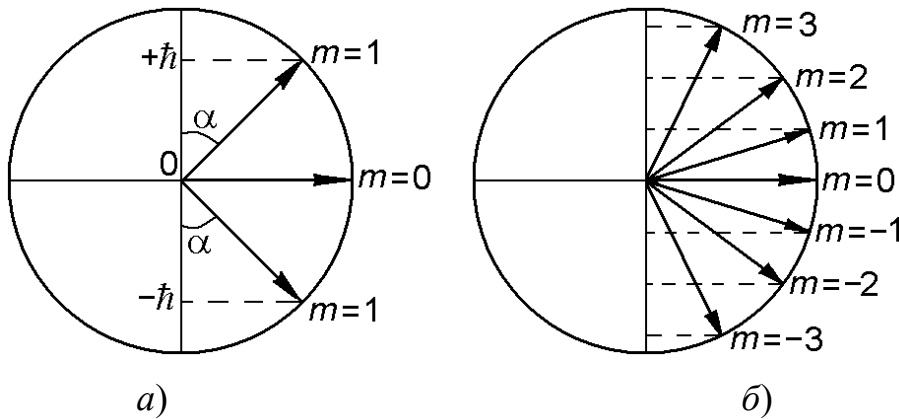


Рисунок 1.9 – Ориентации орбитального момента импульса в пространстве для различных значений  $m$

Рассмотрим случай б) Состояние  $4f$  описывается квантовыми числами:  $n = 4; l = 3; m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ .

Энергия электрона в состоянии  $n = 4$  в электрон-вольтах равна  $E_4 = -13,6/16 = 0,85 \text{ эВ}$ .

Квадрат момента импульса для  $l = 3$ :

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2; \quad L^2 = 3 \cdot 4\hbar^2 = 12\hbar^2.$$

Проекции момента импульса на ось  $OZ$  равны  $L_z = m\hbar$ , где  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ .

Таким образом,  $L_z$  принимают 7 значений:  $L_z = 0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$ .

Вектор  $\vec{L}$  показан на рис. 1.9 б для различных значений  $m$  при  $l = 3$  стрелками.

Подставим в формулы численные значения:

$$L^2 = 12\hbar^2 = 1,33 \cdot 10^{-67} \text{ (Дж} \cdot \text{с)}^2, \quad L = 3,64 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с};$$

$$L_z = 0; \quad L_z = \pm 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с};$$

$$L_z = \pm 2,11 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}; \quad L_z = \pm 3,16 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

а)  $E_2 = -3,4 \text{ эВ}; L^2 = 2,22 \cdot 10^{-68} \text{ Дж}^2 \cdot \text{с}^2;$   
 $L_z = 0; \pm 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с};$   
 Ответ: б)  $E_4 = -0,85 \text{ эВ}; L^2 = 13,3 \cdot 10^{-68} \text{ Дж}^2 \cdot \text{с}^2;$   
 $L_z = 0; \pm 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}; \pm 2,11 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с};$   
 $\pm 3,16 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$

2. Какие из переходов электрона в атоме водорода запрещены правилами отбора: а)  ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$ , б)  ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$ , в)  ${}^2D_{5/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$ .

Дано:

а)  ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$

б)  ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$

в)  ${}^2D_{5/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$

Найти:

$\Delta L - ? \quad \Delta J - ?$

Решение:

В квантовой механике возможны только такие переходы, в которых выполняются правила отбора по квантовым числам  $L$  и  $J$ , являющиеся следствием закона сохранения момента импульса. В результате орбитальное квантовое число  $L$  должно измениться при переходе на  $\pm 1$  ( $\Delta L = \pm 1$ ), квантовое число  $J$  полного момента импульса

атома либо не изменяется, либо изменяется на  $\pm 1$ , т.е.  $\Delta J = 0; \pm 1$ . Задача сводится к проверке изменения квантовых чисел  $L$  и  $J$  в переходах, указанных в условиях задачи.

Состояние атома в квантовой механике считается заданным, если известны орбитальное  $L$ , спиновое  $S$  и полное  $J$  квантовые числа для атома. Атом водорода содержит один электрон, и его состояние определяется квантовым состоянием этого электрона, т.е. его квантовыми числами  $L, S, J$ . Информацию о квантовых числах атома можно получить, если условно записать терм атома следующим образом  ${}^{2S+1}L_J$ , где под  $L$  понимают одну из букв латинского алфавита  $S, P, D, F$  и т.д., которые соответствуют значениям орбитального



квантового числа  $L = 0, 1, 2, 3$  и т.д. Правый нижний индекс дает значение квантового числа  $J$ . У атома водорода  $J$  принимает два значения  $J + S, J - S$ , где  $S = 1/2$  – спин атома. Верхний левый индекс указывает мультиплетность термов и дает сведения о спиновом квантовом числе  $S$ . Найдем квантовые числа  $L, S, J$  для термов, приведенных в условии задачи.

В случае а) атом переходит из состояния  ${}^2S_{1/2}$  в состояние с термом  ${}^2P_{3/2}$ . Найдем квантовые числа атома в состоянии  ${}^2S_{1/2}$ .

Орбитальное квантовое число  $L = 0$ , полное квантовое число  $J = 1/2$ , а спиновое  $1/2$ . В состоянии  ${}^2P_{3/2}$  орбитальное число  $L = 1$ , полное квантовое число  $J = 3/2$ , а спиновое  $1/2$ . Таким образом, при этом квантовом переходе орбитальное число изменилось на  $\Delta L = +1$ , квантовое число  $J$  изменилось на единицу, закон сохранения момента импульса выполняется, переход  ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$  **возможен**. Квантовое число  $n$  может принимать любые значения.

В случае б) совершается переход  ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$ . Терм  ${}^2S_{1/2}$  описывает состояние с  $L = 0, J = 1/2, S = 1/2$ , а терм  ${}^2D_{3/2}$  – состояние с  $L = 2, J = 3/2, S = 1/2$ . Квантовое число  $L$  изменилось при переходе на  $\Delta L = +2$ , что противоречит правилу отбора, следовательно, несмотря на то, что  $\Delta J = +1$ , такой **переход невозможен**.

В случае в) атом переходит из состояния  ${}^2D_{5/2}$  в состояние  ${}^2P_{1/2}$ . Терм  ${}^2D_{5/2}$  описывает квантовое состояние с  $L = 2, J = 5/2, S = 1/2$ , а терм  ${}^2P_{1/2}$  характеризуется квантовыми числами  $L = 1, J = 1/2, S = 1/2$ . Правило отбора по квантовому числу  $L$  ( $\Delta L = 1$ ) выполняется. Изменение числа  $J$  равно 2, это значит, что **подобного квантового перехода в природе не существует**.

Ответ: Переходы б) и в) запрещены правилами отбора.

3. Потенциал ионизации атома лития  $\varphi_i = 5,39$  В, первый потенциал возбуждения  $\varphi_1 = 1,85$  В. Найти ридберговские поправки.

Дано:  
 $n = 2$   
 $\varphi_i = 5,39$  В  
 $\varphi_1 = 1,85$  В  
Найти:  
 $\sigma_s, \sigma_p - ?$

Решение:

В атомах металлов внешний валентный электрон несколько деформирует электронный остов, и тем самым искажает поле, в котором движется. Это приводит к тому, что разрешенные значения энергии внешнего электрона зависят не только от главного квантового числа  $n$ , как у атома водорода, но и от орбитального квантового числа  $l$ :

$$E_{n,l} = -\frac{\hbar R}{(n + \sigma_l)^2},$$

где  $\sigma_l$  – ридберговская поправка, зависящая от  $l$ .

В атоме лития ( $n = 2$ ) первый потенциал возбуждения  $\varphi_1$ , соответствующий переходу внешнего валентного электрона из основного  $2s$  в возбуждённое  $2p$  состояние, определяется соотношением:

$$e\varphi_1 = E_{2p} - E_{2s} = -\hbar R \left[ \frac{1}{(2 + \sigma_p)^2} - \frac{1}{(2 + \sigma_s)^2} \right]. \quad (1)$$

Потенциал ионизации, соответствующий переходу электрона из состояния  $2s$  в бесконечность:

$$e\varphi_i = \frac{\hbar R}{(2 + \sigma_s)^2}. \quad (2)$$

Чтобы найти поправки  $\sigma_s$  и  $\sigma_p$ , решим совместно уравнения (1) и (2). Получаем:

$$e\varphi_1 = -\frac{\hbar R}{(2 + \sigma_p)^2} + e\varphi_i,$$

или 
$$\sqrt{\frac{e(\varphi_i - \varphi_1)}{\hbar R}} = \frac{1}{2 + \sigma_p}.$$

Отсюда 
$$\sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar R}{e(\varphi_i - \varphi_1)}} - 2.$$

Поправку  $\sigma_s$  найдем из уравнения (2): 
$$\sigma_s = \sqrt{\frac{\hbar R}{e\varphi_i}} - 2.$$

Подставим численные значения:

$$\sigma_p = \sqrt{\frac{1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 2,07 \cdot 10^{16}}{1,6 \cdot 10^{-19} (5,39 - 1,85)}} - 2 = -0,04;$$

$$\sigma_s = \sqrt{\frac{1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 2,07 \cdot 10^{16}}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 5,39}} - 2 = -0,41.$$

Ответ:  $\sigma_s = -0,41$ ;  $\sigma_p = -0,04$ .

4. Сколько и какие значения квантового числа  $J$  может иметь атом в состоянии с квантовыми числами  $S = 2$ ,  $L = 3$ ? Найти возможные значения полных механических и полных магнитных моментов в этих состояниях.

Решение:

Дано:  
 $S = 2$   
 $L = 3$   
Найти:  
 $J - ?$   
 $L_J - ?$   
 $\mu_J - ?$

Квантовое число полного момента импульса  $J$  принимается значения  $J = S + L; S + L - 1; \dots; |L - S|$ , при этом изменение  $J$  происходит в соответствии правилом отбора:  $\Delta J = 0; \pm 1$ . Полный механический момент атома равен:  $L_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$ . Полный магнитный момент атома:  $\mu_J = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}$ , где фактор Ланде

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

При  $S = 2$ ,  $L = 3$  квантовое число  $J$  принимает всего 5 значений: 5, 4, 3, 2, 1. Для этих значений  $J$  находим:

$$L_J = \hbar \sqrt{30}; \hbar \sqrt{20}; \hbar \sqrt{12}; \hbar \sqrt{6}; \hbar \sqrt{2}.$$

Находим значения фактора Ланде:

$$g_{J=5} = \frac{3}{2} + \frac{2 \cdot 3 - 3 \cdot 4}{2 \cdot 5 \cdot 6} = \frac{13}{10}; \quad g_{J=4} = \frac{3}{2} + \frac{2 \cdot 3 - 3 \cdot 4}{2 \cdot 4 \cdot 5} = \frac{27}{20};$$

$$g_{J=3} = \frac{3}{2} + \frac{2 \cdot 3 - 3 \cdot 4}{2 \cdot 3 \cdot 4} = \frac{5}{4}; \quad g_{J=2} = \frac{3}{2} + \frac{2 \cdot 3 - 3 \cdot 4}{2 \cdot 2 \cdot 3} = 1;$$

$$g_{J=1} = \frac{3}{2} + \frac{2 \cdot 3 - 3 \cdot 4}{2 \cdot 1 \cdot 2} = 0.$$

Тогда значения магнитных моментов:

$$\mu_{J=5} = -\mu_B \frac{13}{10} \sqrt{30} = -7,12\mu_B; \quad \mu_{J=4} = -\mu_B \frac{27}{20} \sqrt{20} = -6,04\mu_B;$$

$$\mu_{J=3} = -\mu_B \frac{5}{4} \sqrt{12} = -4,33\mu_B; \quad \mu_{J=2} = -\mu_B \sqrt{6} = -2,45\mu_B;$$

$$\mu_{J=1} = 0.$$

$$\text{Ответ: } J = 5, 4, 3, 2, 1; L_J = \hbar\sqrt{30}; \hbar\sqrt{20}; \hbar\sqrt{12}; \hbar\sqrt{6}; \hbar\sqrt{2}.$$

$$\mu_{J=5} = -7,12 \cdot \mu_B; \mu_{J=4} = -6,04 \cdot \mu_B; \mu_{J=3} = -4,33 \cdot \mu_B;$$

$$\mu_{J=2} = -2,45 \cdot \mu_B; \mu_{J=1} = 0.$$

5. Некоторый атом кроме заполненных оболочек имеет три электрона ( $s$ ,  $p$  и  $d$ ) и находится в состоянии с максимально возможным для этой конфигурации полным механическим моментом. Найти в соответствующей векторной модели атома угол между спиновым и полным механическими моментами данного атома.

Дано:

$s, p, d$

$L_J = L_{J\max}$

Найти:

$\alpha - ?$

Решение:

В векторной модели атома векторы  $\vec{L}_J$ ,  $\vec{L}_L$ ,  $\vec{L}_S$  складываются геометрически (рис. 1.10). Согласно теореме косинусов  $L_L^2 = L_J^2 + L_S^2 - 2L_JL_S \cos \alpha$ , отсюда искомый угол между векторами  $\vec{L}_J$  и  $\vec{L}_S$  найдем из

соотношения:  $\cos \alpha = \frac{L_J^2 + L_S^2 - L_L^2}{2L_JL_S}$ , где  $L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ ;

$L_S = \hbar\sqrt{S(S+1)}$ ,  $L_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}$ .

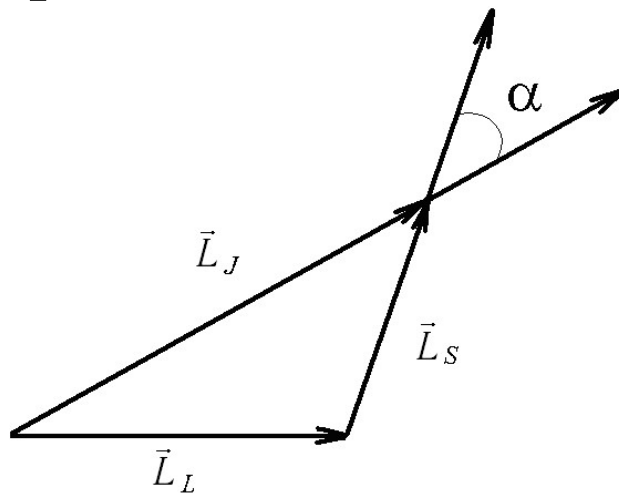


Рисунок 1.10 – Векторная модель атома

В атоме имеется три электрона в  $s$ ,  $p$  и  $d$ -состояниях. Для  $s$ -электрона  $l = 0$  и  $L_l = 0$ ; для  $p$ -электрона  $l = 1$  и  $L_l = \hbar\sqrt{2}$ ; для  $d$ -электрона  $l = 2$  и  $L_l = \hbar\sqrt{6}$ . Согласно правилам Хунда минимальной

энергией обладает состояние с максимальным спиновым моментом атома, т.е. спины всех электронов параллельны и  $S = 3 \cdot 1 / 2 = 3 / 2$ ,

$$\text{тогда } L_S = \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2}} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{15}.$$

Согласно условию задачи полный момент импульса атома  $L_J$  максимален, кроме того, мы установили, что спиновый момент тоже максимален, тогда орбитальный момент атома максимален с квантовым числом  $L = 0 + 1 + 2 = 3$ ,  $L_{L_{\max}} = \hbar \sqrt{12}$ .

$$\text{Поэтому, } J_{\max} = L + S = 3 + 3 / 2 = 9 / 2 \text{ и } L_{J_{\max}} = \hbar \sqrt{99} / 2.$$

Подставив  $L_L$ ,  $L_S$  и  $L_J$  в выражение для  $\cos \alpha$ , получаем:

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \frac{\hbar^2(J+1)J + \hbar^2 S(S+1) - \hbar^2 L(L+1)}{2\hbar^2 \sqrt{J(J+1) \cdot S(S+1)}} = \\ &= \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1) \cdot S(S+1)}} = \frac{99 + 15 - 12 \cdot 4}{2\sqrt{99 \cdot 15}} = 0,857, \end{aligned}$$

и  $\alpha = 31^\circ$ .

Ответ:  $\alpha = 31^\circ$ .

### 1.3.4. ПРИМЕРЫ ОТВЕТОВ НА ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

1. По какой из предложенных формул рассчитывается суммарный момент импульса электрона в атоме водорода, находящегося в возбужденном состоянии?

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

2)  $L_z = \hbar m$ ;

3)  $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ ;

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

где  $j$ ,  $m$ ,  $l$ ,  $s$  – квантовые числа.

*Решение:* Суммарный момент импульса электрона в атоме водорода, находящегося в возбужденном состоянии, определяется орбитальным  $L$  и собственными моментами импульса  $L_s$  электрона. С учётом того, что атом водорода находится в возбуждённом состоянии, орбитальное квантовое число может быть отлично от нуля  $l$ . Тогда, квантовое число полного момента импульса электрона  $j$  будет зависеть и от спинового квантового числа  $s$  и от орбитального. Правильный вариант ответа: **1)**  $L_j = \hbar \sqrt{j(j+1)}$ .

2. Как изменится собственный магнитный момент электрона в атоме водорода, если атом перейдет из основного состояния в возбужденное?

- 1) увеличится;
- 2) уменьшится;
- 3) не изменится;
- 4) электрон в атоме водорода не обладает магнитным моментом;
- 5) для правильного ответа недостаточно данных.

*Решение:* Собственный магнитный момент электрона в атоме водорода определяется выражением  $\mu_s = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)}$ , где спиновое квантовое число принимает только одно значение  $s = 1/2$ . Поэтому, при переходе электрона из одного состояния в атоме водорода в другое, собственный магнитный момент электрона остаётся неизменным. Правильный вариант ответа: **3) не изменится.**

3. Сколько возможных ориентаций орбитального момента импульса имеет электрон в атоме водорода в  $d$ -состоянии?

- |       |       |       |
|-------|-------|-------|
| 1) 1; | 2) 2; | 3) 3; |
| 4) 4; | 5) 5; | 6) 6. |

*Решение:* Количество ориентаций в пространстве (проекций на направление внешнего магнитного поля) орбитального момента импульса электрона в атоме водорода определяется выражением  $L_z = m\hbar$ , где  $m$  – магнитное квантовое число, которое может принимать только значения  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . Состоянию  $d$  соответствует  $l = 2$ . Поэтому, допустимые значения  $m = -2, -1, 0, +1, +2$ , т.е. всего 5 значений. Правильный вариант ответа: **5) 5.**

4. Чему равно отношение собственной энергии электрона в основном состоянии водородоподобного иона с  $Z = 3$  к собственной энергии электрона в основном состоянии атома водорода?

- |         |         |       |
|---------|---------|-------|
| 1) 9;   | 2) 3;   | 3) 1; |
| 4) 1/3; | 5) 1/9. |       |

*Решение:* Собственные энергии электрона в основном состоянии водородоподобного иона с  $Z \neq 1$  и электрона в основном состоянии атома водорода определяются соответственно формулами (1.3.9) и (1.3.8). Видно, что отношение этих выражений, равно  $Z^2$ . Правильный вариант ответа: **1) 9.**

5. Какие из приведенных ниже пси-функций характеризуют вырожденные состояния электрона в атоме водорода, находящегося в первом возбужденном состоянии?

а)  $\psi_{210 \pm \frac{1}{2}}$ ;

б)  $\psi_{111 \pm \frac{1}{2}}$ ;

в)  $\psi_{110 \pm \frac{1}{2}}$ ;

г)  $\psi_{200 \pm \frac{1}{2}}$ ;

д)  $\psi_{100 \pm \frac{1}{2}}$ ;

е)  $\psi_{22 \pm 1 \pm \frac{1}{2}}$ .

1) в, д;

2) а, е;

3) а, в;

4) а, г;

5) б, в.

*Решение:* Первому возбуждённому состоянию атома соответствует главное квантовое число  $n = 2$  (оно является первым индексом у волновой функции). Но, состояния соответствующего варианту е) быть не может, т.к. второй индекс – орбитальное квантовое число  $l$ , которое может принимать только значения  $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$ . Т.е., при  $n = 2$ , второй индекс не может принимать значение больше единицы. Правильный вариант ответа: **4) а, г.**

## ГЛАВА 4. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ

### 1.4.1. КЛАССИФИКАЦИЯ ЧАСТИЦ И ИХ КОЛЛЕКТИВОВ. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Статистическая физика изучает свойства систем, состоящих из большого числа независимых частиц. Классическая статистика изучает свойства макрочастиц (молекул) – распределение Максвелла и Больцмана.

В квантовой статистике необходимость статистического описания является следствием особенности микрочастиц: корпускулярно – волновой дуализм, дискретность и случайность.

В квантовой механике существует важное положение о неразличимости тождественных частиц. Состояние системы, состоящей из  $n$  тождественных частиц, характеризуется в квантовой механике некоторой полной волновой функцией.

В квантовой механике все частицы делятся на два класса: **фермионы и бозоны**.

*К фермионам* относятся частицы с полуцелым спином ( $\pm \hbar / 2$ ) (электроны, протоны, нейтроны, дырки...). Фермионы – ярко выраженные индивидуалисты, подчиняющиеся принципу Паули (в данной системе тождественных фермионов любые два из них не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии).

*Бозоны* – частицы с нулевым или целочисленным спином (0; или четное  $\pm \hbar / 2$ ) (фотоны, фононы, составные частицы из четного числа фермионов, например, атомные ядра с четным суммарным числом протонов и нейтронов –  ${}^4\text{He}$ ). Бозоны – коллективисты, стремятся к объединению.

Система тождественных фермионов описывается антисимметричной полной волновой функцией, бозонов – симметричной.

Специфика частиц влияет на свойства коллектива, как целого. Если на  $N$  одинаковых частиц приходится  $G$  состояний, то при выполнении условия  $G \gg N$  специфика фермионов и бозонов проявиться не может, поскольку в распоряжении каждой частицы имеется множество свободных состояний. Подобные коллективы называются не вырожденными.

**Условие невырожденности:**

$$\frac{N}{G} \ll 1.$$



Если же число частиц больше числа состояний, то становится актуальным вопрос о том, как заполнять состояния (поодиночке или коллективно). Такие коллективы называются вырожденными.

Вырожденные коллективы могут образовываться только из квантовых частиц, т.к. только у таких частиц параметры *состояния* *изменяются дискретно*, вследствие чего число состояний  $G$  – конечно. У классических частиц параметры состояния меняются непрерывно,  $G$  – бесконечно велико. Газ называется вырожденным, если его свойства отличаются от свойств классического идеального газа.

Свойства этих коллективов частиц описываются **полной статистической функцией распределения**  $N(E)$ . Ее можно представить в виде произведения числа состояний  $g(E)dE$ , приходящихся на интервал  $dE$ , на вероятность заполнения этих состояний частицами:

$$N(E)dE = g(E)dE \cdot f(E). \quad (1.4.1)$$

Функция  $f(E)$  – называется функцией распределения (*вероятность обладать данным значением энергии  $E$* ). Функцию  $f(E)$  можно трактовать как среднее число частиц, находящихся в данном состоянии (Например, если  $f(E) = 0,1$ , то на десять состояний приходится одна частица).

### **Число состояний**

$$g(E)dE = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} \cdot dE, \quad (1.4.2)$$

где  $V$  – объем кристалла. Функция  $g(E)dE$  определяет *число состояний микрочастиц в интервале энергий  $dE$ , заключенных между  $E$  и  $(E + dE)$  (без учета спина)*.

Для электронов каждой фазовой ячейке соответствует два состояния, отличающиеся направлением спина ( $\pm \hbar/2$ ). Поэтому для электронов:

$$g(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} \cdot dE. \quad (1.4.3)$$

**Плотность состояний**  $g(E)$  – *число состояний в единичном интервале энергий*.

$$g(E) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (1.4.4)$$

Видно, что плотность состояний зависит от массы частицы.

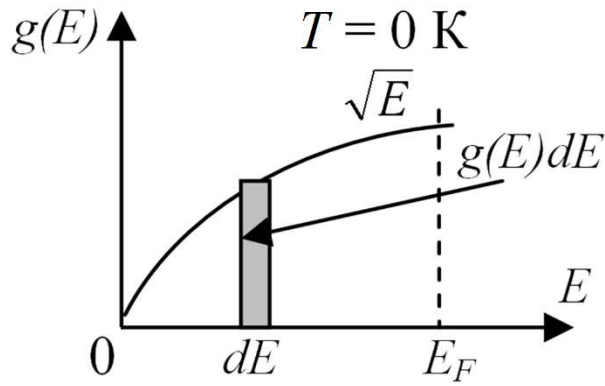


Рисунок 1.11 – Плотность состояний

Общее число состояний от 0 до  $E_F$ :

$$G = \int_0^{E_F} g(E)dE = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m)^{3/2} \cdot E_F^{3/2}. \quad (1.4.5)$$

Энергия Ферми:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}. \quad (1.4.6)$$

Концентрация частиц:

$$n = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3}. \quad (1.4.7)$$

Энергия Ферми  $E_F$  – максимальная энергия электронов в металле при  $T = 0$  К.

Температура, соответствующая энергии Ферми, это *температура вырождения*:

$$T_B = \frac{E_F}{k}. \quad (1.4.8)$$

Средняя энергия электронов проводимости в металле

$$\langle E \rangle = 0,6E_F. \quad (1.4.9)$$

Давление электронного газа

$$P = \frac{2}{5} E_F \cdot n. \quad (1.4.10)$$

Функция распределения Ферми – Дирака (для фермионов)

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}. \quad (1.4.11)$$

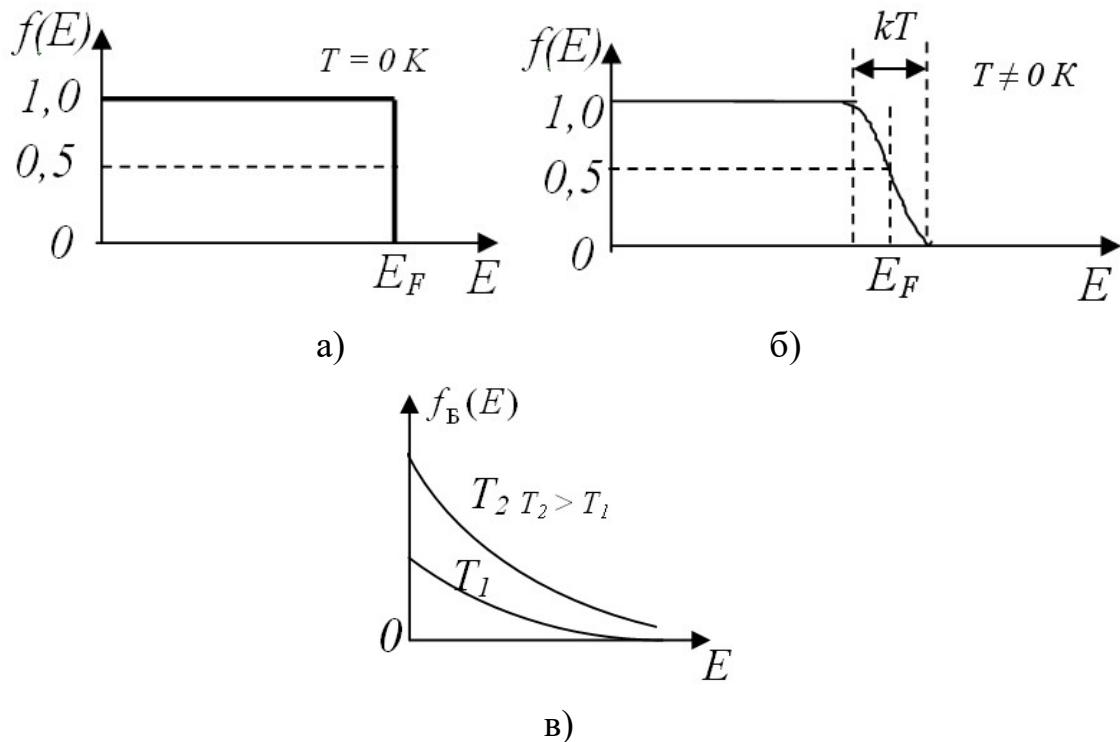


Рисунок 1.12 – Функции распределения: а) Ферми – Дирака при  $T = 0 \text{ K}$ ; б) Ферми – Дирака при  $T \neq 0 \text{ K}$ . в) Бозе – Эйнштейна

Функция распределения Бозе – Эйнштейна (для бозонов)

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1} \quad (1.4.12)$$

где  $\mu$  – химический потенциал; для фотонов и фононов  $\mu = 0$ .

#### 1.4.2 ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Какова вероятность заполнения электронами в металле энергетического уровня, расположенного на 6 мэВ ниже уровня Ферми при температуре  $T = 126 \text{ K}$ ?

Дано:  
 $(E - E_F) = -6 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$   
 $T = 126 \text{ K}$   
Найти:  
 $\langle N(E) \rangle = ?$

Решение:

а) Определить вероятность заполнения электронами в металле энергетического уровня  $E$  при температуре  $T$  – это значит определить среднее число фермионов  $\langle N \rangle$  в каждом квантовом состоянии с заданными

значениями энергии  $E$  и температуры  $T$ .

б) Распределение Ферми – Дирака (1.4.11) как раз позволяет рассчитать искомую величину

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) + 1}. \quad (1)$$

в) При подстановке числовых данных в (1) следует помнить, что энергия должна быть выражена в джоулях, для чего электрон-вольты необходимо умножить на заряд электрона ( $-6 \cdot 10^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}$ ) Дж.

г) Окончательно имеем:

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{-6 \cdot 10^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 126}\right) + 1} = 0,635.$$

Ответ:  $\langle N(E) \rangle = 0,635$ .

*Примечание:* Получили, что среднее число фермионов меньше 1. Это означает, что на 1000 энергетических состояний приходится 635 фермионов.

2. Вычислить максимальную энергию, которую могут иметь свободные электроны в металле (медь) при температуре  $T = 0$  К. Принять, что на каждый атом меди приходится по одному валентному электрону. Плотность меди  $\rho$  принять равной  $8,9 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>. Молярная масса меди  $\mu = 64 \cdot 10^{-3}$  кг/моль.

Дано:  
 $T = 0$  К,  
 $\rho = 8,9 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>  
 $\mu = 64 \cdot 10^{-3}$  кг/моль  
 Найти:  
 $E_F = ?$

Решение:

а) Максимальная энергия, которую могут иметь электроны в металле при  $T = 0$  К – это энергия Ферми (по определению). Она связана с концентрацией  $n$  свободных электронов формулой (1.4.6)

$$E_F = \left(\frac{3}{2} \cdot \frac{n}{A}\right)^{2/3}, \quad (1)$$

где  $A = 4\pi \left(\frac{\sqrt{2m}}{h}\right)^3 = 1,06 \cdot 10^{56} \text{ м}^{-3} \cdot \text{Дж}^{-3/2}$ ,  $h$  – постоянная Планка,  $m$  – масса электрона.

б) Концентрация свободных электронов по условию задачи равна концентрации атомов, которая может быть найдена по формуле

$$n = \rho \cdot N_A / \mu, \quad (2)$$

где  $\rho$  – плотность меди;  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$  1/моль – число Авогадро;  $\mu$  – молярная масса.

в) Подставляя (2) в (1), получаем

$$E_F = \left( \frac{3}{2} \frac{\rho \cdot N_A}{A \cdot \mu} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (3)$$

г) Произведём вычисления

$$E_F = \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{8,9 \cdot 10^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{1,06 \cdot 10^{56} \cdot 64 \cdot 10^{-3}} \right)^{\frac{2}{3}} = 1,18 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} = 7,4 \text{ эВ}.$$

Ответ:  $E_F = 7,4$  эВ.

3. Найти среднее число фотонов в одном состоянии при температуре  $T = 15$  К, длина волны которых равна 2,2 мм.

Дано:

$$T = 15 \text{ К}$$

$$\lambda = 2,2 \text{ мм} = 2,2 \cdot 10^{-3} \text{ м}$$

Найти:

$$\langle N(E) \rangle = ?$$

Решение:

а) Фотоны подчиняются распределению Бозе – Эйнштейна, поэтому воспользуемся формулой

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E}{kT}\right) - 1}. \quad (1)$$

б) Используем связь энергии  $E$  с длиной волны  $\lambda$

$$E = hc/\lambda. \quad (2)$$

в) С учётом (2) функция распределения принимает вид:

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right) - 1},$$

где  $h$  – постоянная Планка,  $k$  – постоянная Больцмана.

г) Подставляя числовые данные, имеем:

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 15 \cdot 2,2 \cdot 10^{-3}}\right) - 1} = 1,85.$$

Ответ:  $\langle N(E) \rangle = 1,85$ .

4. Во сколько раз число свободных электронов, приходящихся на один атом металла при  $T = 0$  К, больше в алюминии, чем в меди, если уровни Ферми равны для алюминия 11,7 эВ и меди 7,0 эВ?

Дано:

$$T = 0 \text{ К};$$

$$E_{F1} = 11,7 \text{ эВ}$$

$$E_{F2} = 7,0 \text{ эВ}$$

$$\mu_1 = 27 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$$

$$\mu_2 = 64 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$$

$$\rho_1 = 2,7 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$$

$$\rho_2 = 8,9 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$$

Найти:

$$\left( \frac{N_e}{N_a} \right)_1 / \left( \frac{N_e}{N_a} \right)_2 = ?$$

Решение:

а) Искомое отношение можно выразить через отношение концентраций

$$\left( \frac{N_e}{N_a} \right)_1 / \left( \frac{N_e}{N_a} \right)_2 = \left( \frac{n_e}{n_a} \right)_1 / \left( \frac{n_e}{n_a} \right)_2. \quad (1)$$

б) Концентрация свободных электронов в металле при  $T = 0$  определяется формулой (1.4.7)

$$n(E_F) = \frac{2}{3} A E_F^{3/2}, \quad (2)$$

г) Концентрацию атомов металла определим по формуле

$$n_a = \frac{\rho \cdot N_A}{\mu}, \quad (3)$$

где  $\rho$  – удельная плотность металла,  $\mu$  – молярная масса,  $N_A$  – число Авогадро.

д) Подставляя (2) и (3) в (1), получаем

$$\frac{n_e}{n_a} = A \cdot \frac{2}{3} E_F \cdot \frac{\mu}{\rho N_A} \quad (4)$$

е) Окончательно имеем расчётную формулу:

$$\left( \frac{n_e}{n_a} \right)_1 / \left( \frac{n_e}{n_a} \right)_2 = \left( \frac{E_{F1}}{E_{F2}} \right)^{3/2} \cdot \frac{\mu_1}{\mu_2} \cdot \frac{\rho_2}{\rho_1} \quad (5)$$

Подстановка числовых данных даёт искомое отношение

$$\left( \frac{n_e}{n_a} \right)_1 / \left( \frac{n_e}{n_a} \right)_2 = \left( \frac{11,7}{7,0} \right)^{3/2} \cdot \frac{27}{64} \cdot \frac{8,9}{2,7} = 3.$$

$$\text{Ответ: } \left( \frac{n_e}{n_a} \right)_1 / \left( \frac{n_e}{n_a} \right)_2 = 3.$$

5. Объём первого кристалла равен  $56 \text{ см}^3$ , а второго –  $29 \text{ см}^3$ . Найти отношение плотности состояний первого кристалла при энергии  $5 \text{ эВ}$  к плотности состояний второго кристалла при энергии  $13 \text{ эВ}$ .

Дано:  
 $V_1 = 56 \text{ см}^3$   
 $V_2 = 29 \text{ см}^3$   
 $E_1 = 5 \text{ эВ}$   
 $E_2 = 13 \text{ эВ}$   
Найти:  
 $\frac{g(E_1)}{g(E_2)} = ?$

Решение.

а) Напомним: плотность состояний  $g(E)$  – это физическая величина, численно равная количеству квантовых состояний электрона в единичном интервале энергий. Она описывается формулой (3.1)

$$g(E) = AV\sqrt{E}. \quad (1)$$

где  $A = 4\pi \left( \frac{\sqrt{2m}}{h} \right)^3 = 1,06 \cdot 10^{56} \text{ м}^{-3} \cdot \text{Дж}^{-3/2},$

$V$  – объём образца,  $m$  – масса электрона.

б) Отношение плотностей состояний для двух образцов кристалла определится по формуле:

$$\frac{g(E_1)}{g(E_2)} = \frac{V_1}{V_2} \sqrt{\frac{E_1}{E_2}}. \quad (2)$$

в) При подстановке числовых значений нет необходимости перевода заданных значений объёма и энергии в систему СИ, поскольку в формуле (2) дано их отношение. Итак, окончательно имеем:

$$\frac{g(E_1)}{g(E_2)} = \frac{56}{29} \sqrt{\frac{5}{13}} = 1,19.$$

Ответ:  $\frac{g(E_1)}{g(E_2)} = 1,19.$

### 1.4.3. ПРИМЕРЫ ОТВЕТОВ НА ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

1. Какие, из приведённых ниже утверждений, правильно определяют смысл понятия «энергия Ферми»?

а) максимальная энергия электронов в металле при  $T = 0 \text{ К}$ ;

б) показывает величину средней энергии электронов в металле при  $T = 0 \text{ К}$ ;

в) показывает, что при  $T = 0 \text{ К}$  электроны в металле занимают все энергетические уровни;

г) величина энергии, при которой вероятность заполнения электронами в металле при  $T = 0 \text{ К}$ , равна  $0,5$ .

- |          |             |             |
|----------|-------------|-------------|
| 1) а, б; | 2) б, в;    | 3) б, г;    |
| 4) а, г; | 5) а, б, г; | 6) а, в, г. |

*Решение:* Согласно определению энергии Ферми – это максимальная кинетическая энергия электронов в металле при  $T = 0$  К. Если в формуле для функции распределения Ферми – Дирака энергию приравнять энергии Ферми, то мы получим, что вероятность заполнения данного энергетического уровня при  $T = 0$  К будет равна  $1/2$ . Правильный вариант ответа: **4) а, г.**

2. Какова вероятность заполнения электронами в металле при температуре 170 К в состоянии с энергией 3 эВ, если энергия Ферми этого металла равна 6 эВ?

- |          |         |          |
|----------|---------|----------|
| 1) 0;    | 2) 0,5; | 3) 0,75; |
| 4) 0,92; | 5) 1.   |          |

*Решение:* Вероятность заполнения электронами в металле энергетических состояния определяет функция распределения

Ферми – Дирака:  $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$ . Подставив числовые значения,

предварительно переведя все величины в СИ, получим:

$f(E) = \frac{1}{e^{-204,6} + 1} = 1$ . Правильный вариант ответа: **5) 1.**

3. Температура вырождения определяет...

- а) температуру кристалла в условиях эксперимента;
- б) границу, выше которой начинают проявляться квантовые эффекты;
- в) границу, выше которой квантовые эффекты перестают быть существенными;
- г) температуру, соответствующую энергии Ферми.

- |          |          |          |
|----------|----------|----------|
| 1) а;    | 2) б;    | 3) а, в; |
| 4) а, г; | 5) в, г; | 6) б, г. |

*Решение:* Температура вырождения – это температура, при которой вырожденный коллектив частиц (электронный газ) становится невырожденным. Эта температура для электронного газа соответствует энергии Ферми. Для невырожденного коллектива частиц справедлива классическая статистика Максвелла – Больцмана. Для вырожденного электронного газа – квантовая статистика Ферми – Дирака. Правильный вариант ответа: **5) в, г.**



4. Укажите **верные** утверждения:

а) частицы с полуцелым спином подчиняются статистике Ферми – Дирака;

б) частицы с целочисленным спином подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна;

в) бозоны подчиняются принципу Паули;

г) химический потенциал частиц с целочисленным спином равен энергии Ферми;

1) а, б;

2) а, в;

3) в, г;

4) а, г;

5) б, г;

6) в, г;

7) б, в.

*Решение:* Разберём каждое утверждение в отдельности. Утверждение *а)* справедливо, т.к. частицы с полуцелым спином называются фермионами и подчиняются статистике Ферми – Дирака. Утверждение *б)* справедливо, т.к. частицы с целочисленным спином называются бозонами и подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна. Утверждение *в)* неверно, т.к. частицы с целочисленным спином не подчиняются принципу Паули. Он справедлив только для частиц с полуцелым спином. Утверждение *г)* неверно, т.к. понятие энергии Ферми вводится для электронного газа в кристаллической решётке. Электроны являются фермионами и имеют полуцелый спин. К частицам с целочисленным спином не применимо понятие энергии Ферми. Правильный вариант ответа: **1) а, б.**

5. Укажите **верные** утверждения

а) нуклоны и фотоны относятся к классу бозонов;

б) нуклоны и фотоны относятся к классу фермионов;

в) химический потенциал фотонов равен нулю;

г) фермионы и бозоны достаточно больших энергий подчиняются статистике Максвелла – Больцмана;

д) плотность состояний для фотонов в два раза меньше, чем для электронов.

1) а, в;

2) а, г;

3) б, г;

4) б, д;

5) а, б, в;

6) б, в, г;

7) в, г, д.

*Решение:* Разберём каждое утверждение в отдельности. Утверждения *а)* и *в)* неверны, т.к. нуклоны (протоны и нейтроны) – частицы с полуцелым спином и являются фермионами, а фотоны имеют целочисленный спин и являются бозонами. Утверждение *в)* верно. Утвер-

ждение *г) верно*, т.к. при высоких энергиях частиц функции распределения, соответствующие квантовым статистикам Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна, ведут себя неотличимо от функции распределения Максвелла – Больцмана, соответствующей классическим статистикам. Утверждение *д) верно*, т.к. плотность состояний для электронов в два раза больше благодаря тому, что в одном состоянии могут находиться два электрона отличающиеся направлением спина. Правильный вариант ответа: **7) в, г, д.**

РАЗДЕЛ 2. ЭЛЕМЕНТЫ ФИЗИКИ ТВЁРДОГО ТЕЛА  
ГЛАВА 1. ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ ТЕЛ  
2.1.1. ПОНЯТИЕ НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ

В твердом теле атомы при любой температуре, включая и температуру абсолютного нуля, совершают колебания около своего положения равновесия. Число таких колебаний (нормальных мод) определяется как числом атомов в кристалле, так и особенностями самого кристалла.

Атомы в твердом теле взаимодействуют друг с другом, поэтому возбуждение колебаний одного атома передается его соседу и т.д. Все возможные колебания сильно связанных между собой атомов можно представить как совокупность взаимодействующих волн различной длины, распространяющихся по всему объему кристалла.

При распространении продольных волн в однородной неограниченной струне движение каждого из элементов струны происходит лишь в направлении ее длины, т.е. число нормальных колебаний равно числу атомов в струне.

При распространении тепловых колебаний в монокристалле для одного и того же волнового вектора  $\vec{k}$ , параллельного направлению [100], возникают три упругие волны – одна продольная ( $L$ ) и две поперечные ( $T_1$  и  $T_2$ ). При этом две независимые волны сдвига имеют одинаковые скорости. В случае произвольного направления вектора  $\vec{k}$  возникают три поляризованные волны, распространяющиеся с разными скоростями, которые не зависят от частоты колебаний. Число нормальных колебаний  $3N$ . Следует напомнить, что модуль волнового вектора  $\vec{k}$  есть волновое число  $k$ .

Энергия нормального колебания решетки – это энергия гармонического осциллятора

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (2.1.1)$$

$n = 0, 1, \dots$  – колебательное квантовое число,  $\hbar$  – постоянная Планка. Энергия осциллятора имеет лишь дискретные значения. Слагаемое  $\hbar\omega/2$  представляет энергию нулевых колебаний. Он показывает, что даже при  $T = 0$  К атомы не находятся в положениях равновесия, а совершают колебания.

Таким образом, полная тепловая энергия колебаний атомов в цепочке складывается из энергии нормальных колебаний, ведущих себя

подобно линейным гармоническим осцилляторам с собственной частотой  $\omega$ .

В случае продольных колебаний атомов одномерной решетки, когда на линейную элементарную решетку с параметром  $2a$  приходится два атома, каждому значению волнового числа  $k$  соответствуют два значения  $\omega$ , следовательно, и две моды колебаний. Возможные значения  $k$  ограничены соотношением:

$$-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq +\frac{\pi}{2a}.$$

При этом число допустимых неэквивалентных значений  $k$  в интервале  $\left(-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right)$  равно  $N$  – числу элементарных ячеек в цепочке.

Так как каждому значению  $k$  соответствуют две моды колебаний, то полное число нормальных мод в интервале  $\left(-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right)$  равно числу степеней свободы в системе, т.е.  $2N$ .

Для трехмерной решетки модуль вектора  $\vec{k}$  меняется в интервале  $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq +\frac{\pi}{a}$  и принимает столько значений, сколько элементарных ячеек содержит кристалл (т.е.  $N$  значений). Разрешенные значения  $\vec{k}$  распределены в фазовом  $\vec{k}$ -пространстве с плотностью  $V/(2\pi)^3$ .

Упругую волну с волновым вектором  $\vec{k}$  и поляризацией  $\vec{s}$  можно рассматривать как совокупность  $n(\vec{k}, \vec{s})$  квантов с энергией  $\hbar\omega$ . Эти кванты упругой волны называются фононами. Величина  $\hbar\omega$  есть наименьшая порция энергии возбуждения над основным уровнем  $\hbar\omega/2$ . Таким образом, коллективные движения атомов в кристалле представляют собой звуковые волны, а соответствующие им возбуждения – кванты звука или фононы. Движущиеся в кристалле фононы образуют фононный газ.

Фононный газ не может существовать в вакууме. Число фононов в твердом теле зависит от температуры, с ростом температуры оно растет, а при температуре, стремящейся к нулю, число фононов стремится к нулю. Распределение фононов в пространстве подчиняется статистике Бозе-Эйнштейна:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (2.1.2)$$

Средняя энергия нормальных колебаний:

$$\langle E_{\text{н.к.}} \rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad (2.1.3)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана.

### 2.1.2. ТЕПЛОЁМКОСТЬ ТВЁРДЫХ ТЕЛ

В теории теплоёмкости Эйнштейна в твердом теле энергетические уровни атомов, которые рассматриваются как гармонические осцилляторы, образуют некоторую лестницу, состоящую из равноотстоящих ступеней высотой  $\hbar\omega$ . Твердое тело представляет собой совокупность одинаковых гармонических осцилляторов (атомов), которые колеблются независимо друг от друга с одинаковой частотой  $\omega$  в трех взаимно перпендикулярных направлениях. Энергия этих осцилляторов квантована. Средняя энергия квантового осциллятора равна:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp[\hbar\omega/(kT)] - 1}. \quad (2.1.4)$$

Тогда энергия системы из  $N_A$  атомов

$$E = 3N_A \langle \varepsilon \rangle = 3N_A \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}, \quad (2.1.5)$$

а молярная теплоёмкость

$$c_{V\mu} = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{3N_A k (\hbar\omega/kT)^2}{(\exp[\hbar\omega/(kT)] - 1)^2} \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right). \quad (2.1.6)$$

Температура  $\theta_E$ , при которой начинается быстрый спад теплоёмкости, называется характеристической температурой Эйнштейна, она определяется равенством  $\hbar\omega = k\theta_E$ .

Формула Эйнштейна хорошо согласуется с экспериментом при  $T \approx \theta_E$ . При более низких температурах соответствия нет. Теплоёмкость, рассчитанная по Эйнштейну, падает с температурой быстрее, чем в действительности. Эксперимент показал, что при  $T \rightarrow 0$  теплоёмкость диэлектриков изменяется не экспоненциально, а как  $T^3$ . На рис. 2.1 экспериментальная зависимость теплоемкости от температуры

представлена сплошной кривой 1, пунктирная кривая 2 соответствует теплоемкости, рассчитанной по Эйнштейну.

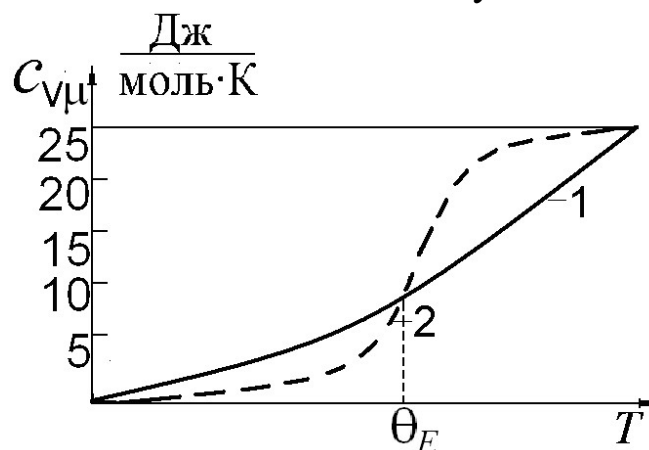


Рисунок 2.1 – Экспериментальная (1) и теоретическая по Эйнштейну (2) зависимости молярной теплоемкости твёрдого тела от температуры

Дебай рассматривал твердое тело, состоящее из  $N$  одинаковых атомов, как сплошную упругую среду, тепловое движение в которой сводится к акустическим колебаниям всевозможных частот распространяющихся упругих волн. Полная тепловая энергия кристалла из  $N$  одинаковых атомов выражается формулой:

$$E_{\text{реш}} = \int_0^{\omega_D} \langle E_{\text{н.к.}} \rangle g(\omega) d\omega. \quad (2.1.7)$$

где  $g(\omega)$  – представляет собой плотность мод колебаний решетки одной из поляризаций, т.е. число нормальных мод колебаний, соответствующих единичному интервалу частоты единичного объема кристалла. Функцию  $g(\omega)$  называют спектральной функцией (плотностью) распределения нормальных колебаний.

В твердом теле возможны три типа акустических колебаний – одно продольное и два поперечных, поэтому спектральная плотность распределения колебаний в интервале  $d\omega$  в силу того, что плотность всех мод равна сумме плотностей отдельных мод, определяется выражением

$$g(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} = \frac{9N\omega^2}{\omega_D^3}, \quad (2.1.8)$$

где  $v$  – усредненная по кристаллографическим направлениям и типам колебаний скорость звука,  $V$  – объем кристалла,  $N$  – число атомов в

кристаллической решётке,  $\omega_D = v\sqrt{6\pi^2 n} = \omega_{\max}$  – характеристическая частота Дебая,  $n = N/V$  – концентрация атомов в кристалле.

С учетом выражения (2.1.8) формулу (2.1.7) перепишем в виде

$$E_{\text{реш}} = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{kT} - 1} \right) \omega^2 d\omega.$$

В решетке не могут распространяться волны с длиной  $\lambda < 2a$ , где  $a$  – постоянная кристаллической решетки.

При сделанных Дебаем предположениях спектральная функция распределения для всех частот описывается выражением

$$g(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{при } \omega > \omega_D \\ \frac{3}{2\pi^2 v^3} \omega^2 = A\omega^2 & \text{при } \omega \leq \omega_{\max} \end{cases}, \quad (2.1.9)$$

что в сумме дает  $\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 3N$ . Это условие нормировки. В выражении (2.1.9)  $A$  не зависит от частоты и является постоянной.

Значение энергии решётки:

$$E_{\text{реш}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{9NkT}{(\theta_D/T)^3} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Это интерполяционная формула Дебая. Здесь  $\theta_D$  – характеристическая температура твердого тела, или температура Дебая. Ее физический смысл в том, что величина  $k\theta_D = \hbar\omega_{\max}$  представляет максимальный квант энергии, способный возбудить колебания решетки. Т.е. при температуре равной характеристической температуре Дебая возбуждаются все возможные колебания с частотами от 0 до  $\omega_{\max}$ . При дальнейшем увеличении температуры, новые колебания не появляются, а происходит лишь увеличение амплитуды уже имеющихся колебаний. Поэтому, в теории теплоёмкости кристаллической решётки различают два диапазона температур: область высоких температур ( $T > \theta_D$ ) и область низких температур ( $T \ll \theta_D$ ).

**В случае высоких температур** ( $kT \gg \hbar\omega$ )

$$E_{\text{реш}} = E_0 + 9Nk\theta_D (\theta_D/T)^4 \int_0^{\theta_D/T} x^2 dx = E_0 + 3NkT.$$

Для одного моля кристаллической решётки

$$E_{\text{реш}\mu} = E_0 + 3RT, \quad (2.1.10)$$

теплоемкость не зависит от температуры (*закон Дюлонга и Пти*):

$$c_{V\mu} = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = 3R. \quad (2.1.11)$$

Согласно закону Дюлонга и Пти при высоких температурах мо-

лярная теплоёмкость  $c_{V\mu} = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = 3N_A \cdot k = 3R$ , где

$R = 8,31 \text{ Дж}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$  – молярная газовая постоянная (универсальная), тогда  $c_{V\mu} = 3 \cdot 8,314 = 25 \text{ Дж}/(\text{моль}\cdot\text{К})$ .

**При низких температурах**  $kT \ll \hbar\omega$ , тогда  $\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$ .

Энергия акустических колебаний  $E = \frac{3\pi^4 Nk\theta_D}{5} \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^4$ .

Теплоемкость, рассчитанная на единицу объема, при низких температурах описывается кубическим законом (*закон кубов Дебая*):

$$c_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{12\pi^4 NkT^3}{5\theta_D^3}. \quad (2.1.12)$$

В металлах носителями теплового движения кроме фононов являются электроны. При низких температурах теплоемкость кристалла определяется только электронной теплоемкостью.

Тепловую энергию в металле при его нагревании воспринимают не все свободные электроны, а только те, энергия которых лежит в интервале  $kT$  вблизи энергии Ферми. Именно эти электроны и определяют теплоемкость электронного газа. Теплоёмкость электронного газа единичного объёма

$$c_V^{\text{эл}} = \left( \frac{\partial U_e(T)}{\partial T} \right)_V = \frac{\pi^2}{3} kN \left( \frac{kT}{E_F(0)} \right). \quad (2.1.13)$$



### 2.1.3. ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ ТВЁРДЫХ ТЕЛ

С повышением температуры происходит расширение твердых тел. Для характеристики этого явления существуют коэффициенты линейного ( $\alpha$ ) и объемного ( $\alpha_V$ ) расширения.

$$\Delta l = l_0 \alpha \cdot \Delta T,$$

где  $l_0$  – длина тела при  $0^\circ\text{C}$ .

$$l = l_0 + \Delta l = l_0(1 + \alpha \cdot \Delta T). \quad (2.1.14)$$

Для большинства твердых тел  $\alpha \cong 10^{-5} - 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ . Физический смысл  $\alpha = \frac{dl}{l_0 \cdot dT}$  – относительное удлинение при нагревании на  $1^\circ\text{C}$ .

В результате линейного расширения увеличивается, и объем тела:

$$V = V_0(1 + \alpha_V \Delta T), \quad \text{где} \quad \alpha_V \cong 3\alpha.$$

В реальных кристаллах силы взаимодействия между атомами в решетке нельзя считать абсолютно упругими, они зависят от смещения атомов из положения равновесия не линейно, а содержат ангармонические члены, влияние которых возрастает с ростом температуры. Тепловое расширение решетки (или изменение равновесного объема  $V$  при изменении температуры) обусловлено асимметрией взаимодействия между атомами, вызванной тем, что сила отталкивания возрастает быстрее при сближении атомов, чем сила притяжения при их удалении друг от друга. Среднее расстояние между атомами определяется выражением:

$$\langle r \rangle = \frac{3\tau}{4\beta^2} kT, \quad (2.1.15)$$

где  $\tau$  – коэффициент ангармоничности колебаний атомов;  $\beta$  – коэффициент упругости. Таким образом, с ростом температуры увеличивается не только амплитуда колебаний атомов, но также происходит увеличение средних расстояний между ними, что ведет к расширению твердого тела.

## 2.1.4. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ТВЁРДЫХ ТЕЛ

### Теплопроводность решетки (диэлектриков)

Уравнение теплопроводности для потока тепловой энергии

$$dQ = -\chi \cdot \text{grad}T \cdot S \cdot dt. \quad (2.1.16)$$

Если поток тепла распространяется в одном направлении, то

$$dQ = -\chi \frac{dT}{dx} S \cdot dt, \Rightarrow Q = \frac{1}{L} \chi (T_1 - T_2) \cdot S \cdot t, \quad (2.1.17)$$

где  $L$  – длина образца,  $S$  – площадь поперечного сечения,  $T_1$  и  $T_2$  – температура концов образца,  $t$  – время измерения теплового потока  $Q$ ,  $\chi$  – коэффициент теплопроводности, он равен количеству тепла, прошедшего через единицу площади в единицу времени при единичном градиенте температур.

Квантовая теория дает следующее выражение для коэффициента теплопроводности решетки:

$$\chi_{\text{реш}} = \frac{1}{3} C_{\text{реш}} \cdot v_{\text{ф}} \cdot \langle l_{\text{ф}} \rangle, \quad (2.1.18)$$

где  $C_{\text{реш}}$  – теплоемкость *единицы объема* кристаллической решетки,  $v_{\text{ф}}$  – средняя скорость распространения фононов,  $\langle l_{\text{ф}} \rangle$  – средняя длина свободного пробега фононов.

### Теплопроводность металлов

В металлах перенос тепла осуществляется не только фононами, но и свободными электронами:

$$\chi_{\text{Me}} = \chi_{\text{реш}} + \chi_e, \quad (2.1.19)$$

где  $\chi_e$  – коэффициент теплопроводности электронов:

$$\chi_e = \frac{1}{3} C_e v_F \langle l_e \rangle, \quad (2.1.20)$$

где  $C_e$  – теплоемкость *единицы объема* электронного газа,  $C_e \sim T$ ;  $v_F = \text{const}$  – скорость электронов на уровне Ферми;  $\langle l_e \rangle$  – длина свободного пробега электронов.

Для чистых металлов отношение коэффициентов теплопроводности решётки и электронов равно:  $\frac{\chi_{\text{реш}}}{\chi_e} \cong 5 \cdot 10^{-2}$ . Т.е. теплопроводность чистых металлов обусловлена, в основном, теплопроводностью электронного газа.

**Закон Видемана–Франца:** отношение теплопроводности металлов к их электропроводности ( $\gamma$ ) пропорционально  $T$  и не зависит от природы металла. Закон был установлен для области  $T \gg 0$ , в области низких температур он не действует. Современная запись закона имеет вид:

$$\frac{\chi}{\gamma} = LT, \quad (2.1.21)$$

где  $L$  – коэффициент пропорциональности, называемый числом Лоренца,  $L = 2,4 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт} \cdot \text{Ом}}{\text{К}^2}$ . Квантовая теория дает:

$$\frac{\chi_e}{\gamma} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k}{e} \right)^2 T, \text{ где } \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k}{e} \right)^2 = 2,45 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт} \cdot \text{Ом}}{\text{К}^2}. \quad (2.1.22)$$

### 2.1.5. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Найти число собственных поперечных колебаний прямоугольного параллелепипеда объемом  $V$  в интервале частот  $\omega, \omega + d\omega$ , если скорость распространения колебаний равна  $v$ .

Дано:  
 $V$   
 $\omega, \omega + d\omega$   
 $v$   
Найти:  
 $dN_{\omega}=?$

Решение:

В каждом заданном направлении в кристалле распространяются в общем случае три поляризованные упругие волны с разными скоростями. Продольные волны – это волны сжатий и растяжений, поперечные – волны сдвига. Одному и тому же волновому вектору  $\vec{k}$  соответствуют три упругие волны – одна продольная и две поперечные. При этом поперечные волны имеют одинаковую скорость.

Число нормальных колебаний одной поляризации в расчете на единицу объема кристалла равно  $dN_{\omega 0}$ :

$$dN_{\omega 0} = \omega^2 d\omega / (2\pi^2 v^3),$$

а в объеме  $V$  с учетом того, что поляризаций две, число собственных поперечных колебаний в интервале частот  $\omega, \omega + d\omega$  возрастает вдвое:

$$dN_{\omega} = \frac{V}{\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega.$$

Ответ:  $dN_{\omega} = \frac{V}{\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega.$

2. Определить температуру Дебая: а) для одномерного кристалла – цепочки из одинаковых атомов, содержащей  $n_0$  атомов на единицу длины; б) для двумерного кристалла – плоской квадратной решетки из одинаковых атомов, содержащей  $n_0$  атомов на единицу площади; в) для простой кубической решетки из одинаковых атомов, содержащей  $n_0$  атомов на единицу объема. Скорости распространения продольных и поперечных колебаний одинаковы и равны  $v$ .

Дано:

$$n_0$$

$$v_{II} = v_{\perp} = v$$

Найти:

$$\theta_D = ?$$

Решение:

Для решения задачи необходимо знать число нормальных колебаний, возникающих в системе. Для этого следует найти функцию распределения нормальных колебаний  $g(\omega)$  по всем возможным частотам от 0 до  $\omega_{\max}$ , где  $\omega_{\max} = k\theta_D/\hbar$  –

максимальная частота, соответствующая температуре Дебая.

а) Рассмотрим линейную цепочку атомов. Длины волн нормальных колебаний, которые могут возникать в такой цепочке, определяются классическим соотношением:

$$\lambda_n = 2L/n,$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots, N$ ;  $L$  – длина цепочки,  $N$  – число атомов в ней. Число атомов, приходящееся на единицу длины,  $n_0 = N/L$ .

Число нормальных колебаний  $Z$  с длиной волны, равной или большей  $\lambda_n$ , равно  $n$ :

$$n = \frac{2L}{\lambda_n} = \frac{2L\omega}{2\pi v},$$

где  $v$  – скорость распространения колебаний.

Функция распределения нормальных колебаний  $g(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{L}{\pi v}$ .

В линейной цепочке атомов может возникать только  $N = n_0L$  нормальных колебаний, поэтому условие нормировки для функции  $g(\omega)$  имеет вид:

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = N.$$

Подставив  $g(\omega)$ , а также пределы функции  $g(\omega)$  в интеграл, получаем  $\frac{L}{\pi v} \omega_{\max} = N$ , и  $\omega_{\max} = \frac{\pi v N}{L} = \pi v n_0$ . Тогда температура Дебая

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_{\max}}{k} = \frac{\hbar}{k} \pi v n_0.$$

б) Рассмотрим двумерный кристалл – плоскую квадратную пластинку. Число нормальных колебаний с длиной волны, равной или большей  $\lambda_n$ , равно

$$Z = \left( \frac{2L}{\lambda_n} \right)^2 = \frac{4L^2}{\lambda_n^2} = \frac{4\pi S \omega^2}{2 \cdot 4\pi^2 v^2} = \frac{S \omega^2}{2\pi v^2},$$

(здесь  $S = 2L^2/\pi$  – площадь пластинки, коэффициент  $2/\pi$  обусловлен квантово-механическим эффектом). В результате функция распределения нормальных колебаний

$$g(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{S\omega}{\pi v^2}.$$

В квадратной пластинке возможно  $2N$  нормальных колебаний, где  $N = n_0 S$ . Тогда условие нормировки принимает вид

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 2N.$$

Подставив в интеграл функцию  $g(\omega)$  и пределы, получаем

$$\frac{S \omega_{\max}^2}{2\pi v^2} = 2N, \quad \text{и} \quad \omega_{\max} = \sqrt{\frac{N}{S} 4\pi v^2} = 2v \sqrt{\pi n_0}.$$

Температура Дебая  $\theta_D = \frac{\hbar}{k} 2v \sqrt{\pi n_0}$ .

в) Рассмотрим трехмерный кристалл – простую кубическую решетку из одинаковых атомов. Число нормальных колебаний, которые могут возникать в решетке, и имеющих длину волны, равную или большую  $\lambda_n$ , равно

$$Z = \left( \frac{2L}{\lambda_n} \right)^3 = 4\pi \frac{V}{\lambda_n^3} = \frac{V \omega^3}{2\pi^2 v^3},$$

где  $V$  – объем кристалла,  $V = 2(2L)^3/\pi$  (множитель  $2/\pi$  обусловлен учетом квантово-механических эффектов). Функция распределения

$$g(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{d}{d\omega} \left( \frac{V\omega^3}{2\pi^2 v^3} \right) = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2.$$

Используем условие нормировки  $\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 3N$ , тогда

$$\frac{3V}{2\pi^2 v^3} \frac{\omega_{\max}^3}{3} = 3N, \quad \text{и} \quad \omega_{\max} = \left( \frac{3N}{V} 2\pi^2 v^3 \right)^{1/3} = \sqrt[3]{6n_0 \pi^2 v^3}.$$

Температура Дебая: 
$$\theta_D = \frac{\hbar}{k} v \cdot \sqrt[3]{6n_0 \pi^2}.$$

Ответ: а)  $\theta_D = \frac{\hbar}{k} \pi v n_0$ ; б)  $\theta_D = \frac{\hbar}{k} 2v \sqrt{\pi n_0}$ ; в)  $\theta_D = \frac{\hbar}{k} v \cdot \sqrt[3]{6n_0 \pi^2}$ .

3. Определить максимальные значения энергии и импульса фонона в меди, дебаевская температура  $\theta_D = 330$  К, плотность  $\rho = 8,9 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>.

Дано:

$$\theta_D = 330 \text{ К}$$

$$\mu = 63,5 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$$

$$\rho = 8,9 \cdot 10^{-3} \text{ кг/м}^3$$

Найти:

$$\varepsilon_{\max} = ?$$

$$p_{\max} = ?$$

Решение:

Упругую волну в кристалле можно представить как совокупность квазичастиц-фононов, распространяющихся со скоростью  $v$ , равной скорости волны. Фонон имеет спин, равный нулю, поэтому подчиняется статистике Бозе-Эйнштейна. Фононы могут рождаться и исчезать, т.е. фононный газ –

система с переменным числом частиц, химический потенциал равновесного фононного газа равен нулю

$$\mu = (dE/dN)_{V,T} = 0.$$

Фонон обладает энергией  $\varepsilon = \hbar\omega$  и импульсом  $p = \hbar/\lambda = \hbar v$ , максимальные значения которых достигаются при температуре Дебая  $\theta_D$ :

$$\varepsilon_{\max} = k\theta_D, \quad p_{\max} = \frac{\varepsilon_{\max}}{v}.$$

Максимальная энергия фонона

$$\varepsilon_{\max} = k\theta_D = 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 330 = 4,6 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} \approx 3 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}.$$

Максимальный импульс фонона найдём как  $p_{\max} = \frac{h}{\lambda_{\min}}$ , где

$\lambda_{\min}$  – наименьшая длина волны фонона,  $\lambda_{\min} \approx 2d$ ,  $d$  – параметр кристаллической решётки, равный среднему расстоянию между атомами.

Очевидно, концентрация атомов равна  $n_0 \approx 1/d^3$ , где  $d^3$  – объём, занимаемый одним атомом в кристалле. Согласно МКТ,  $n_0 = \rho N_A / \mu$ ,

где  $\mu$  – молярная масса. Тогда  $\lambda_{\min} = 2 \cdot \sqrt[3]{\frac{\mu}{\rho N_A}}$ , и  $p_{\max} = \frac{h}{2} \cdot \sqrt[3]{\frac{\rho N_A}{\mu}}$ .

Подставим численные значения:

$$p_{\max} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{2} \sqrt[3]{\frac{8,9 \cdot 10^3 \cdot 6,0 \cdot 10^{23}}{63,5 \cdot 10^{-3}}} = 1,4 \cdot 10^{-24} \text{ кг} \cdot \text{м/с}.$$

Ответ: $\varepsilon_{\max} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$ , $p_{\max} = 1,4 \cdot 10^{-24} \text{ кг} \cdot \text{м/с}$ .
--

4. Оценить давление фононного газа в меди с дебаевской температурой  $\theta_D = 330 \text{ К}$  и концентрацией атомов  $n_0 = 8,4 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

Дано:  
 $\theta_D = 330 \text{ К}$   
 $n_0 = 8,4 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$   
Найти:  
 $p_{\text{фон}} = ?$

Решение:

Газ фермионов и газ бозонов рассматриваем как идеальный газ с той лишь разницей, что вместо распределения Максвелла – Больцмана этот газ подчиняется соответственно статистикам Ферми-Дирака или Бозе-Эйнштейна. Поэтому для

определения давления газа будем использовать основное уравнение

МКТ  $p = \frac{2}{3} n_0 \langle \varepsilon \rangle$ , где  $n_0$  – концентрация частиц (электронов, фотонов

или фононов),  $\langle \varepsilon \rangle$  – средняя энергия частицы.

Найдём давление фононного газа в меди. Учтём, что  $n_0 \langle \varepsilon \rangle = u$  – энергия единицы объёма фононного газа, отсюда

$u = \int_0^{v_{\max}} h\nu dn$ . Найдём, учтя результат первой задачи:

$$dn = \frac{dN}{V} = \frac{12\pi v^2 dv}{v^3} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1}.$$

Тогда

$$u = \int_0^{v_{\max}} \frac{12\pi h v^3 dv}{v^3 \exp(hv/kT) - 1} = \frac{12\pi h}{v^3} \int_0^{v_{\max}} \frac{v^3 dv}{\exp(hv/kT) - 1}.$$

$$\text{Причём } v^3 = \frac{4\pi}{3n_0} \left( \frac{k\theta_D}{h} \right)^3.$$

Подставив значение  $v^3$ , и считая, что  $k\theta_D = hv_{\max}$ , получаем

$$u = \frac{9n_0 h}{v_{\max}^3} \int_0^{v_{\max}} \frac{v^3 dv}{\exp(hv/kT) - 1}, \text{ и давление}$$

$$p_{\text{фон}} = \frac{2}{3} u = \frac{6n_0 h}{v_{\max}^3} \int_0^{v_{\max}} \frac{v^3 dv}{\exp(hv/kT) - 1}.$$

Введём переменную  $x = hv/kT$ , тогда  $dv = \frac{kT}{h} dx$ , и

$$p_{\text{фон}} = \frac{6n_0 k^4 T^4}{h^3 v_{\max}^3} \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

$$\text{При } T = \theta_D \quad x_m = \frac{hv_{\max}}{k\theta_D} = 1.$$

$$\text{В этом случае} \quad \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \int_0^1 \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 0,225.$$

Давление фононного газа равно

$$p_{\text{фон}} = \frac{1,35 \cdot n_0 k^4 \theta_D^4}{h^3 v_{\max}^3} = 1,35 n_0 k \theta_D.$$

$$p_{\text{фон}} = 1,35 \cdot 8,4 \cdot 10^{28} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 330 = 5,16 \cdot 10^8 \text{ Па.}$$

Ответ:  $p_{\text{фон}} = 5,16 \cdot 10^8 \text{ Па.}$



5. Оценить энергию нулевых колебаний моля алюминия, если межатомное расстояние  $a \approx 0,3$  нм, скорость распространения акустических колебаний  $v = 4$  км/с.

Решение:

Дано:  
 $a \approx 0,3$  нм  
 $v = 4$  км/с  
Найти:  
 $E_{0\mu} = ?$

Энергия нормального колебания решетки равна энергии осциллятора, имеющего массу, равную массе колеблющихся атомов, и колеблющегося с частотой, равной частоте нормального колебания:

$$\varepsilon_\nu = \hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \nu\right),$$

где  $\nu$  – колебательное квантовое число осциллятора. При  $\nu = 0$  имеют место нулевые колебания решетки,  $\varepsilon_0 = \hbar\omega/2$ .

Число нормальных колебаний с частотами в интервале  $\omega, \omega + d\omega$  в трехмерном кристалле с одинаковыми атомами, равно

$$dZ = g(\omega)d\omega = \frac{3V}{2\pi^2v^3} \omega^2 d\omega.$$

Энергия нулевых колебаний в этом интервале частот определяется как  $dE_0 = \varepsilon_0 dZ = \frac{3V\hbar}{4\pi^2v^3} \omega^3 d\omega$ , а вся энергия нулевых колебаний равна интегралу

$$E_0 = \int_0^{\omega_{\max}} dE_0 = \frac{3V\hbar}{4\pi^2v^3} \frac{\omega_{\max}^4}{4} = \frac{3}{16} \frac{V\hbar}{\pi^2v^3} \omega_{\max}^4.$$

Подставим  $\omega_{\max} = \left(\frac{3N}{V} \cdot 2\pi^2v^3\right)^{1/3}$ , получаем:

$$E_0 = \frac{3}{16} \frac{V\hbar}{\pi^2v^3} \frac{3N}{V} 2\pi^2v^4 \cdot \sqrt[3]{\frac{3N}{V} \cdot 2\pi^2} = \frac{9}{8} \hbar v N \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}.$$

Очевидно, объем кристалла  $V = 2N \cdot a^3/\pi$ , где  $N$  – число атомов,  $a^3$  – объем одной кристаллической ячейки, тогда

$$E_0 = \frac{9}{8} \hbar v N \sqrt[3]{\frac{6\pi^3 N}{Na^3 2}} = \frac{9}{8} \frac{\hbar v N \pi}{a} \sqrt[3]{3} = \frac{9}{8} \frac{\hbar v N \pi \sqrt[3]{3}}{a}.$$

Для моля вещества  $N = N_A$ , тогда  $E_{0\mu} = \frac{9}{8} \frac{\pi \hbar N_A v}{a} \sqrt[3]{3}$ .

Подставим численные значения:

$$E_{0\mu} = \frac{9}{8} \cdot \frac{3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 4 \cdot 10^3 \cdot \sqrt[3]{3}}{0,3 \cdot 10^{-9}} = 4 \cdot 10^3 \text{ Дж/моль.}$$

Ответ:  $E_{0\mu} = 4 \text{ кДж/моль.}$

6. Вычислить среднюю длину свободного пробега фононов в кварце при некоторой температуре, если при этой температуре теплопроводность  $\chi = 13 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$ , молярная теплоемкость  $c_{V\mu} = 44 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)}$ , средняя скорость звука  $v = 5 \text{ км/с}$ . Плотность кварца  $\rho = 2,65 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ .

Дано:

$$\chi = 13 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$$

$$c_{V\mu} = 44 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)}$$

$$v = 5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$$

$$\rho = 2,65 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$$

$$\mu = 60 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$$

Найти:

$$\langle \lambda_{\phi} \rangle = ?$$

Решение:

Кварц является диэлектриком, в нем имеет место фоновый механизм теплопроводности. Теплопроводность определяется выражением

$$\chi = \frac{1}{3} \langle \lambda_{\phi} \rangle v c_V,$$

где  $c_V$  – теплоемкость единицы объема.

Очевидно, теплоемкость единицы объема  $c_V$  связана с молярной теплоемкостью соотношением

$$c_V = c_{V\mu} \frac{\rho}{\mu}.$$

Тогда теплопроводность и длина свободного пробега фонона равны

$$\chi = \frac{1}{3} \langle \lambda_{\phi} \rangle v \rho c_{V\mu} / \mu, \quad \langle \lambda_{\phi} \rangle = \frac{3\chi\mu}{v\rho c_{V\mu}}.$$

Подставим значения:

$$\langle \lambda_{\phi} \rangle = \frac{3 \cdot 13 \cdot 60 \cdot 10^{-3}}{5 \cdot 10^3 \cdot 2,65 \cdot 10^3 \cdot 44} = 0,07 \cdot 10^{-9} = 7 \cdot 10^{-11} \text{ м.}$$

Ответ:  $\langle \lambda_{\phi} \rangle = 7 \cdot 10^{-11} \text{ м.}$

## 2.1.6. ПРИМЕРЫ ОТВЕТОВ НА ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

1. Какие частицы (квазичастицы) обуславливают перенос тепла в диэлектриках при комнатной температуре?

- |                      |            |
|----------------------|------------|
| 1) электроны;        | 2) дырки;  |
| 3) экситоны;         | 4) фононы; |
| 5) куперовские пары. |            |

*Решение:* Т.к. в диэлектриках нет или практически нет свободных носителей заряда (электронов), то теплоперенос не может осуществляться электронами. Согласно теории теплопроводности диэлектриков, перенос тепла в диэлектриках осуществляется благодаря наличию упругих волн (колебаний атомов в узлах кристаллической решётки) распространяющихся в кристаллической решётке от более нагретого конца кристалла к менее нагретому. Эти упругие волны носят название – фононы. Правильный вариант ответа: **4) фононы.**

2. Что такое температура Дебая?

1) Это температура вырождения, ниже которой электронный газ ведет себя, как вырожденный.

2) Это температура, при которой происходит переход в сверхпроводящее состояние.

3) Это температура, при которой возбуждаются все моды (частоты) колебаний в кристаллической решетке данного твердого тела.

4) Это температура фазового перехода.

*Решение:* Согласно теории, при температуре равной характеристической температуре Дебая возбуждаются все возможные колебания с частотами от 0 до  $\omega_{\max}$ . При дальнейшем увеличении температуры, новые колебания не появляются, а происходит лишь увеличение амплитуды уже имеющихся колебаний. Правильный вариант ответа: **3) Это температура, при которой возбуждаются все моды (частоты) колебаний в кристаллической решетке данного твердого тела.**

3. Выберите формулу, которая описывает среднюю энергию фонона ( $\hbar$  – постоянная Планка;  $\omega$  – круговая частота;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $E_F$  – энергия Ферми).

1) $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{kT} + 1}$ ,	2) $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{kT} - 1}$ ,
3) $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{3}{5} E_F$ ,	4) $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{1}{e^{kT} + 1}$ .

*Решение:* Фононы являются бозонами, которые подчиняются квантовой статистике Бозе – Эйнштейна. Поэтому, средняя энергия фононов определяется как произведение энергии одного фонона  $\hbar\omega$  на функцию распределения Бозе – Эйнштейна  $f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$ . Правиль-

ный вариант ответа: **2)**  $\langle E_\phi \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$ .

4. Теплоемкость моля вещества  $C_\mu$  при температуре много меньше характеристической температуры Дебая ( $T \ll \theta_D$ ) можно рассчитать с помощью следующего выражения ( $R$  – универсальная газовая постоянная;  $i$  – число степеней свободы):

$$1) C_\mu = 3R; \quad 2) C_\mu = 2,87R;$$

$$3) C_\mu = \frac{12\pi^4}{5} R \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3; \quad 4) C_\mu = \frac{i}{2} R.$$

*Решение:* В области низких температур ( $T \ll \theta_D$ ) теплоёмкость кристаллической решётки (диэлектриков) описывается законом кубов Дебая (2.1.12). Правильный вариант ответа: **3)**  $C_\mu = \frac{12\pi^4}{5} R \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3$ .

5. Продолжите фразу. Закон Видемана-Франца устанавливает, что ...

1) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности пропорционально абсолютной температуре;

2) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности пропорционально квадрату абсолютной температуры;

3) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности обратно пропорционально абсолютной температуре;

4) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности пропорционально кубу абсолютной температуры.

*Решение:* Согласно закону Видемана-Франца: отношение теплопроводности металлов к их электропроводности ( $\gamma$ ) пропорционально  $T$  и не зависит от природы металла. Закон справедлив для области высоких температур. Правильный вариант ответа: **1) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности пропорционально абсолютной температуре.**

## ГЛАВА 2. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

### 2.2.1. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ

С точки зрения зонной теории твердого тела энергетический спектр кристалла можно представить как чередование зон – разрешенных, включающих значения энергии, которые электрон может принимать в данном кристалле, и запрещенных, содержащих совокупность значений энергии, которые электрон принимать не может. На энергетической диаграмме кристалла изображают последнюю внешнюю разрешенную зону, заполненную электронами (ее называют валентной зоной), ближайшую к ней запрещенную зону и следующую за ней свободную разрешенную зону, называемую зоной проводимости.

По характеру заполнения энергетических зон все кристаллы делятся на металлы, диэлектрики и полупроводники.

В металлах валентная зона заполнена электронами либо частично, либо целиком, но при этом перекрывается со следующей разрешенной зоной. Заполненные состояния от незаполненных отделяются уровнем Ферми. Таким образом, уровень Ферми в металлах расположен в разрешенной зоне.

Электронный газ в металле является вырожденным, в этом случае концентрация электронов от температуры практически не зависит, и температурная зависимость электропроводности целиком определяется температурной зависимостью подвижности. В области высоких температур в металлах, так же как и в полупроводниках, доминирует рассеяние электронов на фононах, а подвижность обратно пропорциональна температуре. Тогда удельное сопротивление линейно растет с температурой. При низких температурах концентрация фононов становится малой, подвижность определяется рассеянием электронов на примесях и не зависит от температуры. Сопротивление остается постоянным (рис. 2.2).

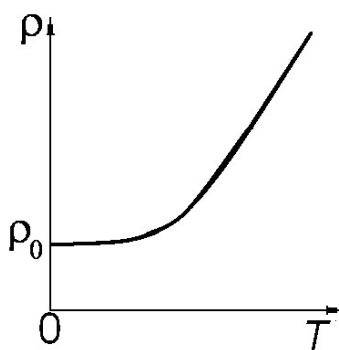


Рисунок 2.2 – Зависимость удельного сопротивления металлов от температуры

Электрические свойства описывает элементарная классическая теория металлов, разработанная Друде и Лоренцем, в соответствии с которой средние скорости электронов равны скорости их теплового движения  $v$ .

Проводимость металла

$$\sigma = \frac{ne^2 \langle \lambda \rangle}{2m}, \quad (2.2.1)$$

где  $\langle \lambda \rangle$  – длина среднего свободного пробега электрона.

Время релаксации

$$\tau = \langle \lambda \rangle / v. \quad (2.2.2)$$

### 2.2.2. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

К полупроводникам относят кристаллы, у которых при  $T > 0$  К валентная зона полностью заполнена электронами, а зона проводимости полностью свободна. Ширина запрещенной зоны составляет не более 3 эВ. Электронный газ в полупроводниках можно считать невырожденным.

В чистом полупроводнике, не содержащем примесей, осуществляется электронная и дырочная электропроводность. При этом следует помнить, что за положительное направление тока принимают направление движения положительных носителей, и движение под действием поля дырок по полю и электронов – против поля создает ток одного направления. В собственном полупроводнике при разрыве ковалентной связи появляется свободный электрон и вакантное место в ковалентной связи – дырка. Это равнозначно переходу электрона из валентной зоны в зону проводимости. Под действием электрического поля электрон и дырка перемещаются в кристалле.

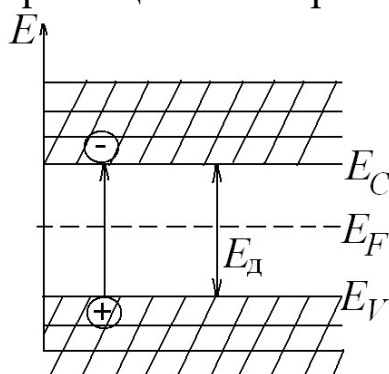


Рисунок 2.3 – Энергетическая диаграмма, соответствующая собственному полупроводнику

На рис. 2.3 представлена энергетическая диаграмма, соответствующая такому переходу, здесь  $E_V$  – энергия, соответствующая «потолку» валентной зоны,  $E_C$  – энергия «дна» валентной зоны,  $E_F$  – энергия Ферми.

Полупроводник, имеющий примеси, называют *примесным*, а его электропроводность, обусловленную наличием примеси, – примесной проводимостью. Дефекты в кристалле создают локальные энергетические уровни в запрещенной зоне собственного полупроводника.

Образование локальных энергетических уровней в случае примесных атомов замещения представлено на рис. 2.4, а. В электронном полупроводнике (*n*-типа) примесь отдает электроны и называется *донорной*. Энергия  $\Delta E_d$ , необходимая для перехода электрона с уровня примеси в зону проводимости, меньше, чем энергия перехода электрона из валентной зоны  $E_g$  (рис. 2.4, б). Благодаря этому при малых температурах концентрация электронов примеси оказывается много больше концентрации собственных носителей. В силу этого доминирующую роль в проводимости будут играть электроны, поэтому их называют основными носителями заряда, а дырки – неосновными носителями заряда.

При ионизации всех атомов примеси концентрация электронов в зоне проводимости равна концентрации атомов примеси:  $n_e = n_d$ . При  $T = T_S$  уровень Ферми  $E_F$  лежит ниже  $E_d$ , поскольку  $E_F = E_d$  при 50% ионизации атомов примеси.

При высоких температурах происходит резкое увеличение концентрации электронов в зоне проводимости, и такое же увеличение концентрации дырок в валентной зоне; уровень Ферми опускается вниз. При  $T = T_i$   $n_e \cong n_p$ , где  $n_e = n_d + n_i$ ,  $E_F$  находится вблизи середины запрещенной зоны и полупроводник становится «почти собственным», его называют *компенсированным*.

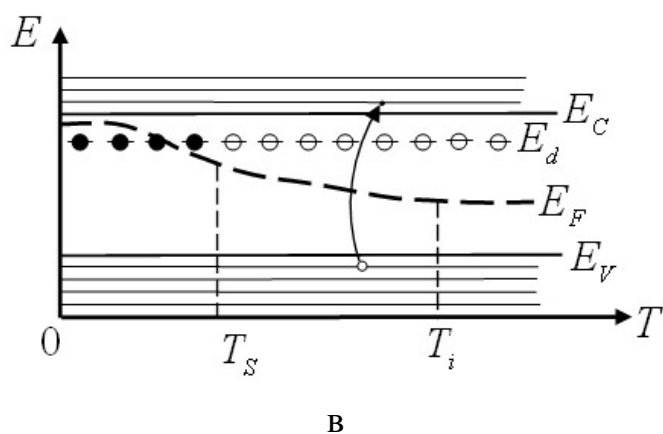
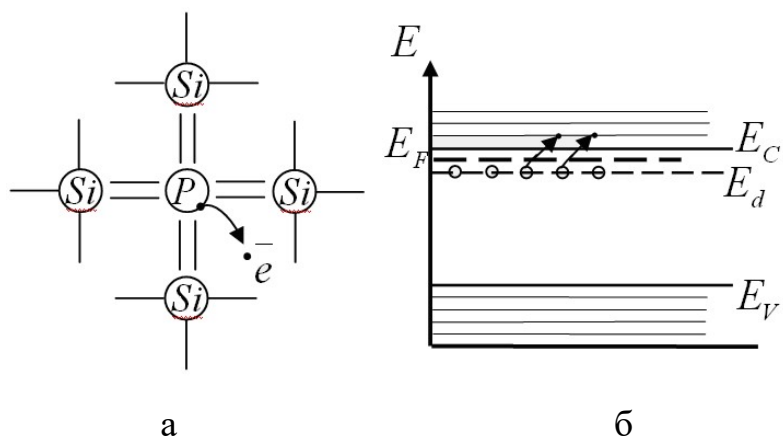


Рисунок 2.4 – Образование локальных энергетических уровней  $E_d$  в случае донорных примесных атомов а, б; Зависимость положения  $E_F$  от  $T$  в полупроводнике  $n$ -типа (в)

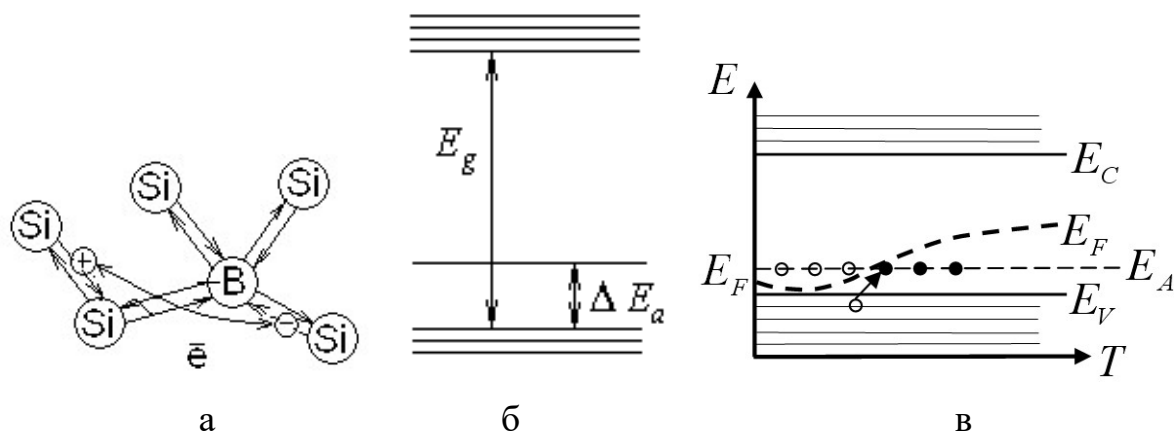


Рисунок 2.5 – Образование локальных энергетических уровней  $E_a$  в случае акцепторных примесных атомов а, б; Зависимость положения  $E_F$  от  $T$  в полупроводнике  $p$ -типа (в)



В дырочном полупроводнике (рис. 2.5, а) осуществляется переход электрона из заполненной связи в вакантную. Это переход электрона из заполненной валентной зоны на локальный уровень примеси (рис. 2.5, б). Он освобождает один из уровней в верхней части валентной зоны и создает в валентной зоне дырку. Переход электронов из валентной зоны на уровни примеси требует меньшей энергии, чем переход их в зону проводимости кристалла ( $\Delta E_a < E_g$ ). Атомы примеси такого рода называют **акцепторными**.

Процессы, протекающие в дырочном полупроводнике при увеличении температуры, полностью аналогичны процессам в полупроводнике *n*-типа: ход  $E_F(T)$  такой же.

Плотность тока для полупроводника

$$\vec{j} = -en\vec{v}_D, \quad (2.2.3)$$

где  $\vec{v}_D$  – дрейфовая скорость электрона.

Внешнее электрическое поле напряженностью  $\vec{E}$  сообщает электрону ускорение  $\vec{a} = \frac{e\vec{E}}{m}$ , за время свободного пробега  $\tau$  электрон приобретает дрейфовую скорость

$$\vec{v}_D = \vec{a}\tau = \frac{e\tau}{m}\vec{E} \quad (2.2.4)$$

и пройдет путь

$$x = \frac{e|\vec{E}|}{2m}\tau^2. \quad (2.2.5)$$

Параметр, связывающий дрейфовую скорость носителей заряда с напряженностью электрического поля, называют подвижностью носителей

$$u = v_D/|\vec{E}|. \quad (2.2.6)$$

Тогда  $\vec{v}_D = u\vec{E}$ , и  $u = e\tau/m$  – подвижность численно равна скорости дрейфа в электрическом поле единичной напряженности.

Плотность тока  $\vec{j} = -en\vec{v} = enu_n\vec{E}$ . (2.2.7)

По закону Ома  $\vec{j} = \sigma\vec{E}$ . Тогда удельная проводимость равна

$$\sigma = \frac{j}{|\vec{E}|} = enu_n = \frac{e^2n\tau}{m}. \quad (2.2.8)$$

Зависимость проводимости полупроводника от температуры определяется температурной зависимостью концентрации и подвижности носителей в полупроводнике. В примесных полупроводниках носители заряда рассеиваются не только на фононах (тепловое рассеяние), но и на ионизированных атомах примеси. Расчеты показывают, что подвижность, обусловленная рассеянием на ионизированной примеси, в случае невырожденного электронного газа пропорциональна  $T^{3/2}$ , а в случае вырожденного не зависит от температуры. Этот механизм рассеяния играет решающую роль при низких температурах, когда концентрация фононов мала. При высоких температурах доминирует рассеяние на фононах – тепловое рассеяние. Зависимость подвижности от температуры для примесного невырожденного полупроводника, учитывающая как рассеяние на ионах, так и рассеяние на фононах, представлена на рис. 2.6. При наличии обоих механизмов рассеяния результирующая подвижность  $u$  определяется выражением

$$\frac{1}{u} = \frac{1}{u_{\text{пр}}} + \frac{1}{u_{\text{T}}}, \quad (2.2.9)$$

где  $u_{\text{пр}}$  – подвижность носителей заряда при рассеянии только на примесях,  $u_{\text{T}}$  – только на нормальных тепловых колебаниях решетки. При этом  $u_{\text{пр}} \sim T^{3/2}$ ;  $u_{\text{T}} \sim T^{-3/2}$ . Поэтому

$$1/u = aT^{-3/2} + bT^{3/2}. \quad (2.2.10)$$

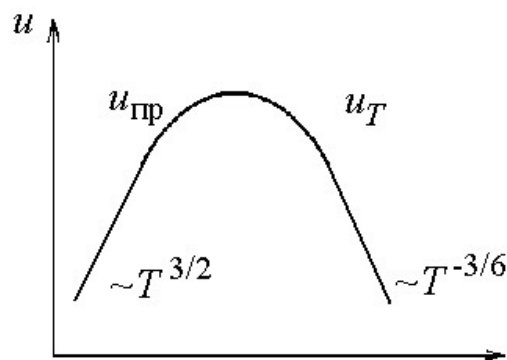


Рисунок 2.6 – Зависимость подвижности от температуры для примесного невырожденного полупроводника

При низких температурах преобладает первое слагаемое, при высоких – второе (рис. 2.6).

Положение максимума на кривой зависит от концентрации дефектов в решетке – с увеличением концентрации дефектов максимум смещается в сторону более высоких температур.

На основании изложенного можно сделать вывод о том, какой должна быть температурная зависимость проводимости примесного полупроводника. В интервале температур, где концентрация носителей, согласно классическому распределению Максвелла-Больцмана, экспоненциально зависит от температуры,  $\sigma(T)$  также практически является экспоненциальной функцией, а в области истощения примеси ход кривой  $\sigma(T)$  определяется подвижностью.

Таким образом, температурный ход проводимости полупроводника определяются в основном экспоненциальным множителем, поэтому удельная проводимость полупроводника равна:

$$\sigma = \sigma_{\text{соб}} + \sigma_{\text{пр}} = C e^{-E_g/2kT} + C' e^{-\Delta E_{\text{пр}}/kT}, \quad (2.2.11)$$

где  $\sigma_{\text{соб}}$ ,  $\sigma_{\text{пр}}$  – собственная и примесная удельные проводимости,  $E_g$  – ширина запрещенной зоны,  $\Delta E_{\text{пр}}$  – энергия активации, необходимая для создания примесного носителя заряда,  $C$ ,  $C'$  – коэффициенты, зависящие от природы полупроводника.

При низкой температуре можно пренебречь первым слагаемым. Тогда,

$$\sigma = \sigma_{\text{пр}} = C' e^{-\frac{\Delta E_{\text{пр}}}{kT}}. \quad (2.2.12)$$

При высоких температурах можно пренебречь вторым слагаемым. Тогда,

$$\sigma = \sigma_{\text{соб}} = C e^{-\frac{\Delta E_g}{2kT}}. \quad (2.2.13)$$

Температурную зависимость проводимости полупроводника удобно анализировать с помощью графика, построенного в координатной плоскости с осями  $\ln \sigma$  и  $1/T$ . График имеет вид ломаной линии (рис. 2.7). В области низких температур имеет место примесная проводимость (участки  $d'' - c''$ ), которая растет с ростом температуры, т.к. растет концентрация примесных носителей заряда. Участки  $c'' - b''$  соответствуют ситуации, когда атомы примеси ионизированы, а собственная проводимость ещё мала. За счет уменьшения подвижности носителей с ростом температуры проводимость полупроводника несколько уменьшается. С дальнейшим ростом температуры начинает преобладать собственная проводимость (участок  $b'' - b'$ ). С ростом

концентрации примесей участки ломаной линии  $d'' - c'' - b''$  смещаются вверх, и температура перехода от примесной проводимости к собственной смещается в сторону более высоких температур. При больших концентрациях примеси атомы примеси остаются неполностью ионизированы вплоть до температуры, при которой начинается собственная проводимость (участок  $b' - d'$ ).

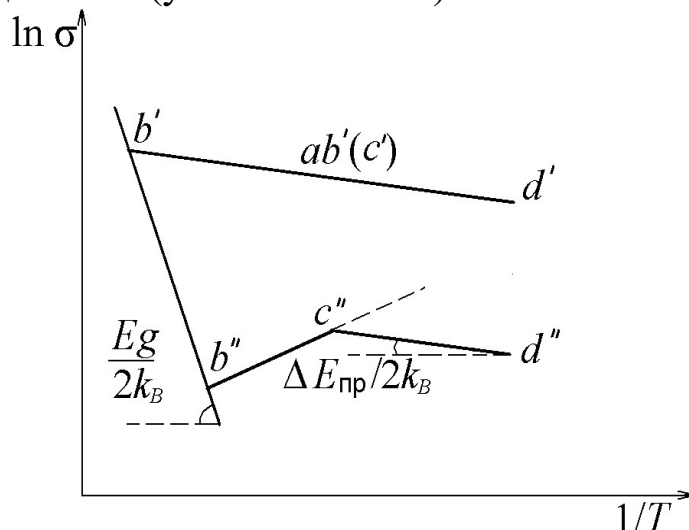


Рисунок 2.7 – График температурной зависимости проводимости полупроводника в координатах  $\ln \sigma$  и  $1/T$

График зависимости  $\ln \sigma = f\left(\frac{1}{T}\right)$  позволяет определить ширину запрещенной зоны  $E_g$  и энергию ионизации примесных носителей  $\Delta E_{\text{пр}}$ .

### 2.2.3. ЭФФЕКТ ХОЛЛА

В металлах и полупроводниках наблюдается *эффект Холла*. Рассмотрим образец прямоугольной формы, по которому течет ток с плотностью  $\vec{j}$ . Образец помещен в магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ , перпендикулярной вектору  $\vec{j}$  (рис. 2.8). Под действием электрического поля  $\vec{E}$  электроны в проводнике приобретают дрейфовую скорость  $\vec{v}_D = \mu \vec{E}$ . На частицу, движущуюся с этой скоростью в магнитном поле, действует сила Лоренца  $\vec{F}_L = -e[\vec{v}_D, \vec{B}]$ , направленная перпендикулярно векторам  $\vec{E}$  и  $\vec{B}$ .

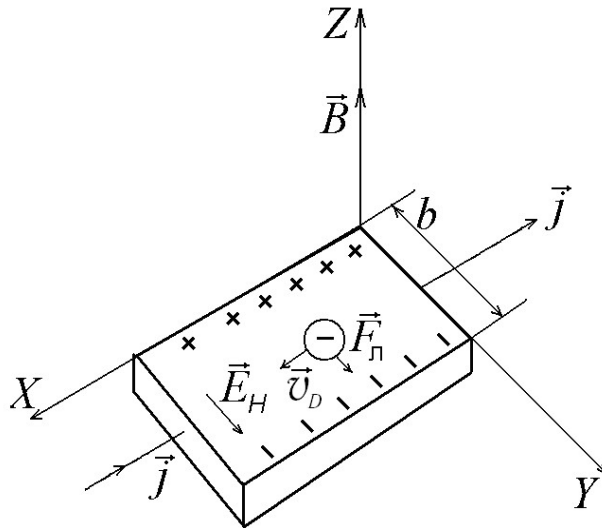


Рисунок 2.8 – Механизм возникновения эффекта Холла

Под действием сил  $-e\vec{E}$  и  $\vec{F}_L$  электрон перемещается вдоль образца, одновременно вращаясь (под действием магнитного поля). Траекторией такого движения является циклоида. Магнитное поле, при котором радиус кривизны траектории много больше длины свободного пробега электрона, называют слабым. Под действием силы Лоренца электроны отклоняются к боковой поверхности образца, и на ней создается избыток отрицательного заряда. На противоположной стороне возникает недостаток отрицательного заряда (избыток положительного). Разделение зарядов происходит до тех пор, пока сила, действующая на электроны со стороны возникшего электрического поля  $\vec{E}_H$ , направленного от одной боковой поверхности к другой, не компенсирует силу Лоренца. Это поле  $\vec{E}_H$  называют полем Холла, а само явление возникновения в образце с текущим по нему током поперечного электрического поля под действием магнитного поля – **эффектом Холла**.

Разделение зарядов прекратится при условии:  $e v_D B - e E_H = 0$ . Тогда разность потенциалов  $U_H$  между боковыми гранями, называемая ЭДС Холла или холловской разностью потенциалов, равна

$$U_H = E_H b = v_D B b, \quad (2.2.14)$$

где  $b$  – ширина образца. Плотность тока  $j = |e| n v_D$ .

Тогда,

$$U_H = \frac{1}{n|e|} j B b = R_H j B b, \quad (2.2.15)$$

где  $R_H = \frac{1}{n|e|}$  – постоянная Холла. По постоянной Холла можно определить тип проводимости полупроводника и концентрацию носителей заряда.

#### 2.2.4. ВНУТРЕННИЙ ФОТОЭФФЕКТ

Изменение электрического сопротивления полупроводника, обусловленное непосредственным действием излучения, называется *фоторезистивным эффектом* или *внутренним фотоэффектом*. Этот эффект можно описать величиной световой проводимости.

$$\sigma_{\text{св}} = eu_n \cdot \Delta n + eu_p \cdot \Delta p, \quad (2.2.16)$$

где  $\Delta n$  и  $\Delta p$  – избыточная концентрация электронов и дырок, создаваемая светом.

Красная граница внутреннего фотоэффекта определяется следующими выражениями:

$\lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E}$  – для собственного полупроводника;  $\lambda_{01} = \frac{hc}{\Delta E_d}$  – для донорного и  $\lambda_{02} = \frac{hc}{\Delta E_a}$  – для акцепторного

полупроводников. Для собственных полупроводников красная граница, как правило, находится в видимой области спектра. Для примесных – в инфракрасной области.

#### 2.2.5. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

1. Концентрация свободных электронов железа  $n = 8,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ , его удельное сопротивление при  $20^\circ\text{C}$   $\rho = 9,71 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}\cdot\text{м}$ . Найти при этой температуре время релаксации, среднюю длину свободного пробега электронов и их подвижность.

Дано:  
 $n = 8,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$   
 $T = 293 \text{ К}$   
 $\rho = 9,71 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}\cdot\text{м}$   
Найти:  
 $\langle \tau \rangle = ?$   
 $\langle \lambda \rangle = ?$   
 $u_e = ?$

Решение:

В задаче рассматривается механизм электропроводности в металлическом проводнике. В этом случае скорости всех электронов проводимости одинаковы и равны скорости их теплового движения  $v$ .

Проводимость металла  $\sigma = \frac{ne^2 \langle \lambda \rangle}{2m v}$ , где  $\langle \lambda \rangle$  – длина среднего свободного пробега электрона.

Время релаксации, т.е. время, за которое электрон проходит путь, равный длине свободного пробега,  $\tau = \langle \lambda \rangle / v$ .

Подвижность электронов  $u_e = v_D / |\vec{E}|$ .

Удельное сопротивление металла – это величина, обратная проводимости:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{2mv}{ne^2 \langle \lambda \rangle}.$$

Тогда длина свободного пробега электрона  $\langle \lambda \rangle = \frac{2mv}{ne^2 \rho}$ .

С учетом выражения для средней скорости теплового движения электронов  $\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$  получаем

$$\langle \lambda \rangle = \frac{2m}{ne^2 \rho} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}.$$

Подставим значения:

$$\begin{aligned} \langle \lambda \rangle &= \frac{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}{8,5 \cdot 10^{28} \cdot 9,71 \cdot 10^{-8} \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}} \sqrt{\frac{8 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 293}{3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}} = \\ &= 0,86 \cdot 10^{-9} \text{ м.} \end{aligned}$$

Время релаксации  $\tau = \lambda / v = 2m / ne^2 \rho$ .

Подставим значения:  $\tau = \frac{0,86 \cdot 10^{-9}}{1,06 \cdot 10^5} = 0,81 \cdot 10^{-14} \text{ с.}$

Найдем подвижность электронов. Средняя скорость упорядоченного движения электронов равна  $\langle v_D \rangle = \frac{E \langle \lambda \rangle}{2mv}$ .

Тогда, подвижность

$$u_e = \frac{eE \langle \lambda \rangle}{2mvE} = \frac{e \langle \lambda \rangle}{2mv}.$$

Подставим значения:

$$u_e = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 0,86 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,06 \cdot 10^5} = 7 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).$$

<p>Ответ: <math>\langle \lambda \rangle = 0,86 \cdot 10^{-9} \text{ м, } \tau = 0,81 \cdot 10^{-14} \text{ с, } u_e = 7 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).</math></p>
---

2. Во сколько раз изменится электропроводность чистого германия при повышении температуры от  $-23^{\circ}\text{C}$  до  $+27^{\circ}\text{C}$ ? Ширина запрещенной зоны для германия  $E_g = 0,74$  эВ.

Дано:  
 $T_1 = 250$  К  
 $T_2 = 300$  К  
 $E_g = 0,74$  эВ  
Найти:  
 $\eta = \sigma_2/\sigma_1 = ?$

Решение:  
 В задаче рассматривается чистый германий, т.е. собственный полупроводник. Его электропроводность описывается выражением

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_g/kT), \quad (1)$$

где  $E_g$  – ширина запрещенной зоны.

Записав выражение (1) для двух температур, получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \sigma_0 \exp(-E_g/kT_1), \\ \sigma_2 &= \sigma_0 \exp(-E_g/kT_2). \end{aligned}$$

Разделим второе уравнение на первое, получаем:

$$\eta = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} = \exp \frac{E_g}{k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right).$$

Подставим значения:

$$\eta = \exp \frac{0,74 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \left( \frac{1}{250} - \frac{1}{300} \right) = e^{5,7} = 287,6 \text{ раза.}$$

Ответ: Увеличится в 287,6 раза.

3. Найти электропроводность германия, если в нем содержится индия в концентрации  $n_1 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$  и сурьмы  $n_2 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ . Подвижность электронов в германии  $u_n = 0,38 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ , дырок  $u_p = 0,18 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ .

Дано:  
 $n_1 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$   
 $n_2 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$   
 $u_n = 0,38 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$   
 $u_p = 0,18 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$   
 $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$   
Найти:  
 $\sigma = ?$

Решение:  
 В собственный полупроводник – германий, внедрено два вида примеси:  
 – трехвалентный индий In, который является акцептором и обеспечивает проводимость  $p$ -типа;  
 – пятивалентная сурьма Sb, которая является донором и обеспечивает проводимость  $n$ -типа.  
 Каждый атом индия создает одну дырку, участвующую в проводимости, поэтому

концентрация дырок  $n_p = n_1$ . Каждый атом сурьмы отдает один



электрон, который участвует в проводимости, поэтому концентрация электронов  $n_n = n_2$ .

В приведенных рассуждениях можно считать, что вся примесь полностью ионизирована. Электропроводность примесного полупроводника равна сумме электропроводностей, создаваемых дырками и электронами.

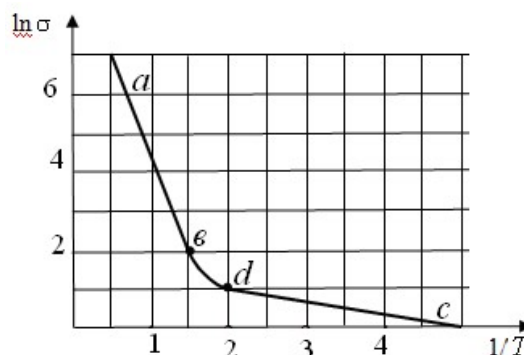
$$\text{Электропроводность равна } \sigma = \sigma_p + \sigma_n = en_p u_p + en_n u_n.$$

Подставим численные значения:

$$\sigma = 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot (10^{22} \cdot 0,18 + 10^{21} \cdot 0,38) = 349 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1} \approx 350 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}.$$

Ответ:  $350 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ .

4. На рисунке показан график зависимости логарифма проводимости от величины, обратной температуре  $T$  (кК), для некоторого полупроводника  $n$ -типа. Найти с помощью этого графика ширину запрещенной зоны и энергию активации донорных уровней.



Дано:  
 $\ln \sigma = f(1/T)$   
Найти:  
 $E_g = ?$   
 $\Delta E_a = ?$

Решение:

Для решения задачи следует воспользоваться температурной зависимостью проводимости собственного и примесного полупроводников.

Собственная проводимость полупроводника возникает при высоких температурах (на рисунке – кривая, соответствующая значениям  $1/T < 1,5 \text{ кК}^{-1}$ ) и определяется выражением

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_g/kT),$$

где  $E_g$  – ширина запрещенной зоны.

Прологарифмировав это выражение, получим

$$\ln \frac{\sigma_0}{\sigma} = \frac{E_g}{2kT}, \quad \text{и} \quad \ln \sigma_0 - \ln \sigma = \frac{E_g}{2kT}.$$

На прямой  $ab$  (рисунок), описывающей собственную проводимость, возьмём две точки, соответствующие значениям  $\sigma_1$ ,  $1/T_1$  и  $\sigma_2$ ,  $1/T_2$ .

Находим  $\ln \sigma_1 = 7$ ;  $1/T_1 = 0,5 \text{ кК}^{-1}$  и  $\ln \sigma_2 = 2$ ,  $1/T_2 = 1,5 \text{ кК}^{-1}$ .

Получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \ln \sigma_0 - \ln \sigma_1 = \frac{E_g}{2k} \frac{1}{T_1} \\ \ln \sigma_0 - \ln \sigma_2 = \frac{E_g}{2k} \frac{1}{T_2} \end{cases}.$$

Вычтем из первого уравнения второе:

$$\ln \sigma_2 - \ln \sigma_1 = \frac{E_g}{2k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right),$$

ширина запрещенной зоны  $E_g = 2k \frac{\ln \sigma_1 - \ln \sigma_2}{1/T_2 - 1/T_1}.$

Подставим численные значения:

$$E_g = 2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 5 \cdot 10^3 = 1,38 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 0,86 \text{ эВ}.$$

Проведя аналогичный расчёт для прямой  $cd$  (рисунок), соответствующей примесной проводимости (при  $1/T > 2 \text{ кК}^{-1}$ ), и учитывая, что проводимость примесного полупроводника определяется выражением

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta E_a/kT),$$

где  $\Delta E_a$  – энергия активации, получаем  $\ln \sigma_1 = 1$  при  $1/T_1 = 2 \text{ кК}^{-1}$  и  $\ln \sigma_2 = 0,5$  при  $1/T_2 = 3,5 \text{ кК}^{-1}$ . Энергия активации равна

$$\Delta E_a = 2k \frac{\ln \sigma_1 - \ln \sigma_2}{1/T_1 - 1/T_2}.$$

Подставив значения, имеем

$$\Delta E_a = 2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot \frac{0,5 \cdot 10^3}{3} = 0,46 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} = 0,03 \text{ эВ}.$$

Ответ:  $E_g = 0,86 \text{ эВ}$ ;  $\Delta E_a = 0,03 \text{ эВ}$ .

5. При измерении эффекта Холла пластину из полупроводника  $p$ -типа ширины  $h = 10 \text{ мм}$  и длины  $l = 50 \text{ мм}$  поместили в магнитное поле с индукцией  $B = 0,5 \text{ Тл}$ . К концам пластины приложили разность потенциалов  $U = 10 \text{ В}$ . При этом холловская разность потенциалов  $U_H = 50 \text{ мВ}$  и удельное сопротивление  $\rho = 2,5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ . Найти концентрацию дырок и их подвижность.

Дано:

$$h = 0,01 \text{ м}$$

$$l = 0,05 \text{ м}$$

$$B = 0,5 \text{ Тл}$$

$$U = 10 \text{ В}$$

$$U_H = 0,05 \text{ В}$$

$$\rho = 2,5 \cdot 10^{-2} \text{ Ом} \cdot \text{м}$$

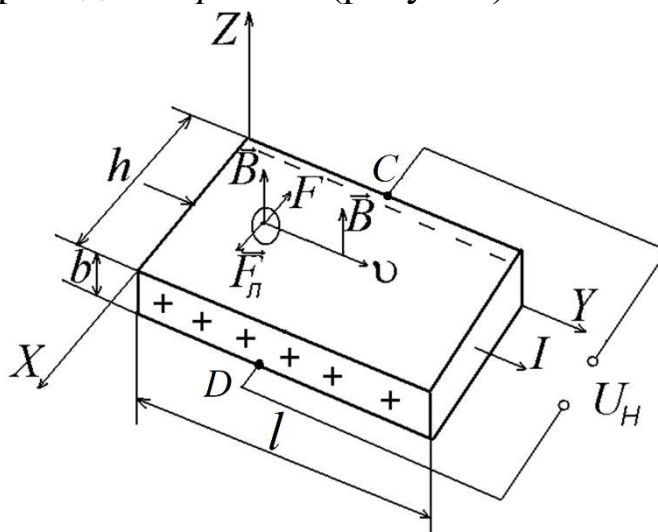
Найти:

$$n_p = ?$$

$$u_p = ?$$

Решение:

В задаче рассматривается эффект Холла в полупроводнике  $p$ -типа (рисунок).



Эффект Холла состоит в том, что при пропускании тока вдоль проводящей пластины, помещённой перпендикулярно линиям внешнего магнитного поля, возникает поперечная разность потенциалов вследствие взаимодействия носителей заряда с магнитным полем. На рисунке в отсутствие магнитного поля разность потенциалов между точками  $C$  и  $D$ , лежащими на одной из эквипотенциальных плоскостей, равна нулю. Если образец поместить в магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ , перпендикулярной направлению тока и плоскости образца, то между точками  $C$  и  $D$  возникает разность потенциалов  $U_H$ , называется холловской ЭДС или холловской разностью потенциалов,

$$U_H = R_H BI / b = R_H Bjl, \quad (1)$$

где  $b$  – толщина образца (см. рис),  $h$  – его ширина,  $I$  – сила тока,  $j$  – плотность тока, определяемая по формуле:

$$j = \frac{I}{S} = \frac{US}{\rho l S} = \frac{U}{\rho l}. \quad (2)$$

Длина образца  $l$  мала, поэтому нелинейностью тока в образце можно пренебречь и считать, что выполняется закон Ома  $I = U/R = US/(\rho l)$ , где  $U$  – разность потенциалов на концах проводника,  $S$  – площадь сечения образца, перпендикулярная к направлению тока.

Постоянная Холла для полупроводника  $p$ -типа равна

$$R_H = A/(en_p), \quad (3)$$

где  $e$  – заряд носителя (дырки),  $n_p$  – концентрация дырок.  $A$  – константа, при рассеянии на ионизированных примесях  $A = 1,95$ .

Решив совместно уравнение (1), (2), (3), найдём концентрацию  $n_p$ .

Подвижность носителей определим из соотношения:

$$R_H / \rho A = u_p. \quad (4)$$

Выразив  $n_p$  из (3), а постоянную Холла из (1), подставив выражение (2) в формулу (1), находим концентрацию дырок

$$n_p = \frac{A}{eR_H} = \frac{AUBh}{eU_H\rho l}.$$

Подставим численные значения:

$$n_p = \frac{1,95 \cdot 10 \cdot 5 \cdot 10^{-1} \cdot 10^{-2}}{5 \cdot 10^{-2} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 2,5 \cdot 10^{-2} \cdot 5 \cdot 10^{-2}} = 0,975 \cdot 10^{22} \approx 10^{22} \text{ м}^{-3}.$$

Подставив выражение (1), (2), (3), в формулу (4), находим подвижность:

$$u_p = \frac{R_H}{\rho A} = \frac{U_n \rho l}{UBh\rho A} = \frac{U_n l}{UBhA}.$$

Подставим значения:

$$u_p = \frac{5 \cdot 10^{-2} \cdot 5 \cdot 10^{-2}}{10 \cdot 5 \cdot 10^{-1} \cdot 10^{-2} \cdot 1,95} = 2,56 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).$$

Ответ: $n_p = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ ; $u_p = 2,56 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).$
---

## 2.2.6. ПРИМЕРЫ ОТВЕТОВ НА ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

1. Выберите формулы, с помощью которых можно рассчитать проводимость собственного полупроводника ( $\sigma_0$  – начальная проводимость;  $\Delta E$  – ширина запрещённой зоны;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $e$  – заряд электрона;  $n$  – концентрация носителей тока;  $u_n$  и  $u_p$  – подвижности электронов и дырок, соответственно).

а)  $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$ ;      б)  $\sigma = \sigma_0 e^{+\frac{\Delta E}{2kT}}$ ;      в)  $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$ ;

г)  $\sigma = \sigma_0 e^{+\frac{\Delta E}{kT}}$ ;      д)  $\sigma = en(u_n + u_p)$ ;      е)  $\sigma = enu_n$ ;

ж)  $\sigma = enu_p$ .

- |           |           |           |
|-----------|-----------|-----------|
| 1) а, д;  | 2) а, е;  | 3) а, ж;  |
| 4) б, д;  | 5) б, е;  | 6) б, ж;  |
| 7) в, д;  | 8) в, е;  | 9) в, ж;  |
| 10) г, д; | 11) г, е; | 12) г, ж. |

*Решение:* В собственных полупроводниках удельная проводимость определяется первым слагаемым уравнения (2.2.11). Поэтому, вариант а) является правильным. В собственных полупроводниках проводимость осуществляется за счёт двух видов носителей заряда – электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне. Поэтому, вариант д) является правильным. Остальные формулы не подходят. Правильный вариант ответа: **1) а, д.**

2. Где располагается уровень Ферми в акцепторном полупроводнике при низких температурах?

- 1) Между донорным уровнем и дном зоны проводимости;
- 2) Между акцепторным уровнем и потолком валентной зоны;
- 3) В валентной зоне вблизи ее потолка;
- 4) В зоне проводимости вблизи ее дна;
- 5) Посередине запрещенной зоны.

*Решение:* Согласно рисунку 2.5, уровень Ферми в акцепторном полупроводнике при низких температурах располагается между потолком валентной зоны и примесным уровнем. Правильный вариант ответа:

**2) Между акцепторным уровнем и потолком валентной зоны.**

3. Какие носители заряда являются основными в полупроводнике *p*-типа?

- 1) Электроны и дырки.
- 2) Только электроны.
- 3) Только дырки.
- 4) Протоны.
- 5) Куперовские пары.

*Решение:* Полупроводником *p*-типа называется полупроводник с акцепторной примесью, основными носителями заряда в котором являются дырки в валентной зоне. Правильный вариант ответа:

**3) Только дырки.**

4. Выберите формулу, по которой можно рассчитать красную границу внутреннего фотоэффекта в собственном полупроводнике ( $h$  – постоянная Планка;  $c$  – скорость света в вакууме;  $\Delta E_0$  – ширина запрещенной зоны;  $\Delta E_d$  – энергия активации донорной примеси;  $\Delta E_a$  – энергия активации акцепторной примеси;  $A$  – работа выхода).

1)  $\lambda_0 = \frac{hc}{A}$ ;

2)  $\lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_0}$ ;

3)  $\lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_a}$ ;

4)  $\lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_d}$ .

*Решение:* Явление внутреннего фотоэффекта заключается в том, что при поглощении кванта электромагнитного излучения происходит изменение электрического сопротивления полупроводника. Оно обусловлено появлением избыточной концентрации электронов и дырок, соответственно в зоне проводимости и в валентной зоне. Для этого необходимо, чтобы энергия поглощаемого кванта в собственном полупроводнике оказалась больше или равна ширине запрещённой зоны. Тогда электрон, поглотив этот квант, сможет из валентной зоны перейти в зону проводимости. Правильный вариант ответа: **2)  $\lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_0}$ .**

5. При введении в полупроводник примеси с валентностью на единицу меньшей, чем у исходного полупроводника, получается:

1) акцепторный полупроводник;

2) донорный полупроводник;

3) туннельный полупроводник;

4) собственный полупроводник;

5) полупроводник с большей электропроводностью.

*Решение:* Примесные атомы с валентностью меньшей на единицу, чем у собственных атомов полупроводника, называются акцепторными, т.к. они способны с лёгкостью принимать валентные электроны атомов собственного полупроводника. При этом, в зоне проводимости не появляются свободные электроны, а в валентной зоне появляются дырки. Такие полупроводники называются акцепторными, или с дырочной проводимостью, или полупроводниками *p*-типа. Правильный вариант ответа: **1) акцепторный полупроводник.**

## СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Савельев, И.В. Курс физики. В 3 томах. Том 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И. В. Савельев. – 8-е изд., стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2023. – 308 с.
2. Савельев, И.В. Сборник вопросов и задач по общей физике / И. В. Савельев. – 11-е изд., 1. стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2023. – 292 с.
3. Иродов, И.Е. Задачи по общей физике / И.Е. Иродов. – 19-е изд., стер. — Санкт-Петербург: Лань, 2022. – 420 с .
4. Иродов, И.Е. Задачи по квантовой физике: учебное пособие / И.Е. Иродов. – 7-е изд. – Москва: Лаборатория знаний, 2024. – 220 с.
5. Калашников, Н. П. Общая физика. Сборник заданий и руководство к решению задач: учебное пособие / Н.П. Калашников, С.С. Муравьев-Смирнов. – 3-е изд., стер. – Санкт-Петербург: Лань, 2020. – 524 с.
6. Чужков Ю.П. Элементы атомной физики и квантовой механики: Сборник тестовых вопросов / Чужков Ю.П. – Томск: ТУСУР, 2011. – 68 с.
7. Лячин А.В., Чужков Ю.П. Атомная физика и физика твёрдого тела: учеб.-метод. Пособие по аудиторным практ. занятиям и самостоятельной работе для студентов всех направлений подготовки / А.В. Лячин, Ю.П. Чужков. – Томск: Томск. гос. ун-т систем упр. и радиоэлектроники, 2018. – 147 с.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### Некоторые физические постоянные и единицы

№	Название	Значение
1	Ускорение свободного падения	$g = 9,8 \text{ м/с}^2$
2	Плотность воды	$\rho = 10^3 \text{ кг/м}^3$
3	Давление при нормальных условиях	$P_0 = 10^5 \text{ Па}$
4	Температура при нормальных условиях	$T_0 = 273 \text{ К}$
5	Число Авогадро	$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$
6	Молярная масса кислорода	$\mu_{O_2} = 0,032 \text{ кг/моль}$
7	Молярная масса водорода	$\mu_{H_2} = 0,002 \text{ кг/моль}$
8	Молярная масса азота	$\mu_{N_2} = 0,028 \text{ кг/моль}$
9	Постоянная Больцмана	$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$
10	Универсальная газовая постоянная	$R = 8,31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}$
11	Элементарный заряд	$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$
12	Коэффициент пропорциональности в законе Кулона	$k = 9 \cdot 10^9 \text{ Н} \cdot \text{м}^2 / \text{Кл}^2$
13	Электрическая постоянная	$\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$
14	Скорость света в вакууме	$c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$
15	Масса покоя электрона	$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$
16	Масса покоя протона	$m_p = 1,007 \text{ а.е.м.}$
17	Масса покоя нейтрона	$m_n = 1,009 \text{ а.е.м.}$
18	Атомная единица массы	$1 \text{ а.е.м.} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$
19	Электронвольт	$1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$

### Значения приставок единиц измерения

Наименование	Обозначение	Множитель
пико	п	$10^{-12}$
нано	н	$10^{-9}$
микро	мк	$10^{-6}$
милли	м	$10^{-3}$
кило	к	$10^3$
мега	М	$10^6$
гига	Г	$10^9$
тера	Т	$10^{12}$

**Кроме того:**

$\pi = 3,14$
$\pi^2 = 10$
$\sqrt{2} = 1,41$
$\frac{6,6}{1,6} = 4,125$