

Квантовая физика

К концу 19 века среди физиков было распространено мнение, что физика как наука в основном закрыта, и новых принципиальных открытий в ней сделать невозможно, осталось только объяснить некоторые частности. К таким незначительным частностям относили спектр излучения абсолютно черного тела, законы фотоэффекта. Их объяснение привело к появлению квантов электромагнитного поля – фотонов. Планк предположил, что энергия излучается порциями (квантами) и смог объяснить спектральный состав теплового излучения, таким образом, начался новый этап построения физической картины мира – квантовая физика.

Эйнштейн, изучая флуктуации энергии теплового излучения, показал, что электромагнитное излучение не только испускается, но и распространяется и поглощается в виде неделимых, локализованных в пространстве порций энергии (квантов или фотонов). Это предположение позволило объяснить закономерности фотоэффекта. Отсюда следует корпускулярно-волновой дуализм света.

В 1911 году Резерфорд предложил ядерную модель атома. С точки зрения классической электродинамики такой атом не мог существовать достаточно долго: вращающийся электрон, движение которого ускоренно, должен излучать и, следовательно, терять энергию и скорость. При этом спектр излучения должен быть непрерывным, т.е. частота излучения должна меняться непрерывно, и в конце концов электрон, теряя энергию, должен упасть на ядро. Однако, оказалось, что атом стабилен и спектр его излучения является линейчатым.

В 1913 году Бор создал неклассическую теорию атома и предложил квантовые постулаты: дискретность энергии атома, дискретность момента импульса электрона, квантованность излучения при переходе атома из одного состояния в другое. Теория Бора была полуклассической, поскольку поведение электрона в атоме описывалось законами классической физики. Эта теория объясняла спектр водородоподобных ионов, но и у неё появились свои

сложности. В рамках этой теории нельзя было произвести расчет интенсивности спектральных линий и расчет многоэлектронных атомов. Все эти трудности были решены построением квантовой механики. Основным положением квантовой механики является то, что любой движущейся частице ставится в соответствие волна. Это положение подтвердилось в опытах по дифракции частиц: электронов, протонов, нейтронов. В квантовой физике, таким образом, обосновывается дуализм волна – частица и для света и для материальных частиц.

Тепловое излучение.

Законы теплового излучения.

Все тела в той или иной степени излучают электромагнитные волны. Излучение телами электромагнитных волн (или свечение тел) может осуществляться за счет различных видов энергии.

Электромагнитное излучение, испускаемое атомом за счет его внутренней энергии, называется тепловым излучением.

Все остальные виды свечения, возбуждаемые за счет любого другого вида энергии, кроме внутренней (тепловой) называются люминисценцией. При этом различают:

1. Фотолюминисценция – свечение, возбуждаемое поглощаемым телом электромагнитным излучением.
2. Хемилюминисценция – свечение тела в результате, происходящих в нем химических реакций (окисление фосфора на воздухе).
3. Электр люминисценция – свечение в газах и твердых телах, возникающее под действием электрического поля.
4. Катод люминисценция – свечение твердых тел, вызванное бомбардировкой их электронами.

Тепловое излучение - единственное, которое находится в термодинамическом равновесии с веществом, т.е. равновесное. При этом

распределение энергии между веществом и излучением остается неизменным для каждой длины волны.

Условно выделяют следующие температур:

$T < 10^2 \text{ k}$ - инфракрасное излучение

$10^2 \text{ k} \leq T \leq 10^3 \text{ k}$ - красное излучение

$T > 10^3 \text{ k}$ - фиолетовое излучение

Спектральной характеристикой равновесного излучения служит спектральная плотность объемной плотности энергии этого излучения.

$$\rho(\nu, T) = \frac{d\omega}{d\nu}$$

$d\omega$ – энергия равновесного излучения в интервале частот от ν до $\nu+d\nu$, заключенная в единице объема поля излучения. Объемная плотность энергии этого поля

$$\omega = \int_0^{\infty} \rho(\nu, T) d\nu$$

Равновесное излучение изотропно, т.е. оно не поляризовано и все направления его распространения равновероятны.

Энергия $d\omega$ равновесного излучения в вакууме в интервале частот от ν до $\nu+d\nu$, падающего за единицу времени на единицу площади поверхности каждого из тел термодинамически равновесной системы.

$$d\omega = \frac{C}{4} \rho(\nu, T) d\nu,$$

где C – скорость света в вакууме.

Для количественной характеристики теплового излучения служит лучеиспускательная способность (спектральная плотность энергетической светимости) тела, численно равная отношению энергии $d\omega$, излучаемой за единицу времени с единицы площади поверхности тела посредством электромагнитных волн в узком интервале частот от ν до $\nu+d\nu$ (или длины волн в вакууме от λ до $\lambda+\Delta\lambda$) к ширине этого интервала.

$$r_{\nu(\nu, T)} = \frac{d\omega}{d\nu}$$

$$r_{\lambda(\lambda, T)} = \frac{d\omega}{d\lambda}$$

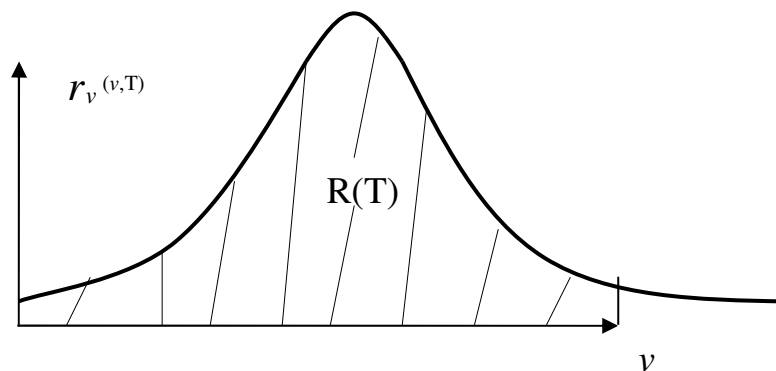
$$r_{\lambda} = \frac{C}{\lambda^2} r_{\nu}$$

Поток световой энергии с площади dS за время dt

$$d\omega = r(\nu, T) d\nu dS dt$$

Энергетическая светимость (интегральная лучеиспускающая способность) тела численно равна энергии электромагнитных волн всевозможных частот (или длин волн) от 0 до ∞ за единицу времени с единицы площади.

$$R_{\nu}(T) = \int_0^{\infty} r_{\nu}(\nu, T) d\nu = \int_0^{\infty} r_{\lambda}(\lambda, T) d\lambda$$



Лучепоглощательная способность (монохроматический коэффициент поглощения) тела $a_{\nu}(\nu, T)$ показывает какая доля энергии электромагнитных волн с частотами от ν до $\nu+d\nu$, падающих на поверхность тела с температурой T , поглощается за единицу времени на единицу площади.

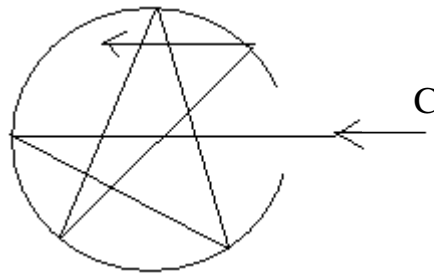
$$a_{\nu}(\nu, T) = \frac{d\omega_{\text{погл}}}{d\omega_{\text{пад}}} \leq 1$$

Абсолютно черное тело – тело, которое полностью поглощает все падающее на него излучение при любой температуре независимо от направления падающего излучения, его спектрального состава и поляризации, ничего не отражая и не пропуская.

Для абсолютно черного тела

$$a_{(v,T)}^o \equiv 1 \quad r_v^o = r_{v(v,T)}^o$$

Моделью абсолютно черного тела может служить небольшое отверстие в замкнутом теплоизолированном объеме.



Если стенки этого объема находятся при некоторой температуре T , то из отверстия C выходит излучение, весьма близкое к излучению абсолютно черного тела при той же температуре T .

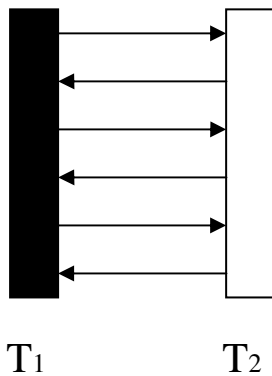
Серое тело – это тело, коэффициент поглощения которого одинаков для всех частот и зависит только от температуры, материала и состояния поверхности.

$$a_v^c = a_{(T)}^c$$

Законы Кирхгофа

Пусть имеем теплоизолированную систему, представляющую собой две бесконечные пластины, одна из которых абсолютно черная. При

термодинамическом равновесии $T_1 = T_2$.



$d\omega_{\text{изл } 2} = d\omega_{\text{погл } 2}$ (иначе изменится температура T2.

$$d\omega_{\text{изл } 2} = r_{\nu} d\nu \quad ; \quad d\omega_{\text{погл } 2} = a_{\nu} d\omega_{\text{над } 2}$$

Очевидно: $d\omega_{\text{над } 2} = d\omega_{\text{изл } 1} = r_{\nu}^{\circ} d\nu$

Тогда $d\omega_{\text{погл } 2} = a_{\nu} r_{\nu}^{\circ} d\nu$

Следовательно: $r_{\nu} d\nu = a_{\nu} r_{\nu}^{\circ} d\nu$

$$r_{\nu}^{\circ} = \frac{r(\nu, T)}{a(\nu, T)}$$

Т.е. отношение спектральной плотности энергетической светимости к поглотительной способности тела равно спектральной плотности энергетической светимости абсолютно черного тела и является для всех тел универсальной функцией частоты и температуры.

$$r_{\nu}^{\circ} = r_{\nu}^{\circ}(\nu, T) \text{ - функция Кирхгофа}$$

Следствия:

1. Если при ν_1 $a(\nu_1, T) = 0$, то $r(\nu_1, T) = 0$.

2. $R_{\nu}(T) = \int_0^{\infty} r(\nu, T) d\nu = \int_0^{\infty} a(\nu, T) r_{\nu}^{\circ}(\nu, T) d\nu$

3. $R_{\nu}^c(T) = a^c(T) \int_0^{\infty} r_{\nu}^{\circ}(\nu, T) d\nu = a^c(T) R_{\nu}^{\circ}(T)$, где

$R_{\nu}^{\circ}(T) = \int_0^{\infty} r_{\nu}^{\circ}(\nu, T) d\nu$ - энергетическая светимость абсолютно черного

тела, зависящая только от абсолютной температуры.

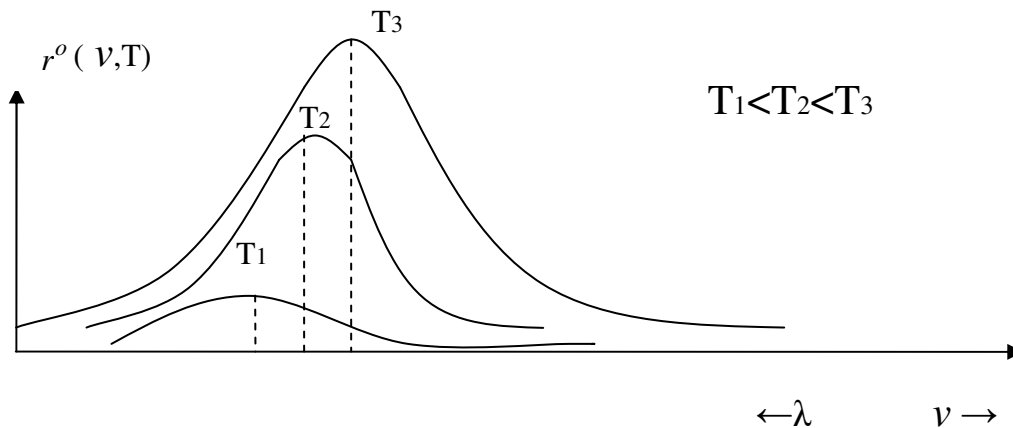
4. Реальное тело близко к серому в ограниченном интервале частот.

$$R_{\nu}(T) = \alpha R_{\nu}^{\circ}, \text{ где}$$

$$\alpha = \frac{\int_0^{\infty} a_{\nu} r_{\nu}^{\circ} d\nu}{\int_0^{\infty} r_{\nu}^{\circ} d\nu} \text{ - коэффициент черноты}$$

Из закона Кирхгофа следует, что всякая сильнопоглощающая система будет сильно излучать.

Вид функции Кирхгофа можно получить из эксперимента, изучая



лучеиспускательную способность абсолютно черного тела.

Энергия излучения абсолютно черного тела распределена неравномерно по его спектру: оно почти не излучает в области очень низких и очень высоких частот.

Энергетическая светимость абсолютно черного тела сильно возрастает с температурой. Максимум испускательной способности с увеличением температуры сдвигается в сторону более коротких длин волн.

На основе экспериментальных данных установлены два закона, описывающие излучение абсолютно черного тела.

1. Закон Стефана-Больцмана. $R(T) = \int_0^{\infty} r_{\nu}^{\circ}(\nu, T) d\nu = \sigma T^4$

ν – энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени абсолютной температуры.

здесь – постоянная Стефана-Больцмана, $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \frac{Вт}{м^2 К^4}$

2. Закон смещения Вина

$$\nu_{\max} = \epsilon T$$

или

$$\lambda_{\max} = \frac{\epsilon \lambda}{T}$$

где $\epsilon_{\lambda} = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$ - постоянная Вина.

Следствие: длина волны (частота), на которую приходится максимум лучеиспускательной способности, соответствует и максимуму лучепоглощательной способности.

Релей и Джинс сделали попытку определить вид функции Кирхгофа исходя из закона о равномерном распределении энергии по степеням свободы. Они предположили, что на каждое электромагнитное колебание приходится энергия kT ($\frac{1}{2}kT$ - на электрическую составляющую и $\frac{1}{2}kT$ - на магнитную составляющую). Для функции Кирхгофа ими была получена формула:

$$r_{\nu}^o(\nu, T) = \frac{2 \pi \nu^2}{c^2} kT \quad (1)$$

Эта формула согласуется с экспериментом только при низких частотах (больших длинах волн) и резко расходится при высоких частотах (малых длинах волн) (рис.).

Вывод формулы был безупречен с классической точки зрения.

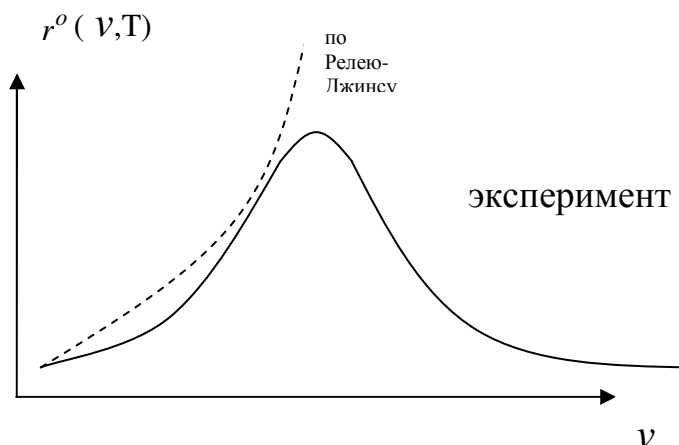


Рис.

Интегрирование (1) в пределах от 0 до ∞ дает бесконечное значение для излучательной способности, следовательно, тепловое равновесие между веществом и излучением невозможно. Вся энергия вещества должна сосредоточиться в излучении – «ультрафиолетовая катастрофа».

В 1900 году Планк предложил квантовую теорию электромагнитного излучения: электромагнитное излучение испускается не непрерывно, а в виде отдельных порций энергии (квантов), энергия которых пропорциональна частоте излучения.

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega,$$

где $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж \cdot с - постоянная Планка,

$\hbar = h/2\pi = 1,0055 \cdot 10^{-34}$ Дж \cdot с = $0,659 \cdot 10^{-15}$ Эв \cdot с - нормированная постоянная Планка.

Для функции Кирхгофа Планк получил выражение:

$$r_v^o(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1} \quad (2)$$

При этом спектральная плотность равновесного излучения равна

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1}.$$

Теоретическая кривая в этом случае хорошо совпадает с экспериментом.

Из (2) получаются и закон Вина и закон Стефана-Больцмана.

Температура абсолютно черного тела может быть определена по характеру его излучения на основании одного из рассмотренных законов излучения. Методы определения температур, основанные на применении законов теплового излучения, носят название методов оптической пирометрии. Оптическая пирометрия дает способ определения абсолютных температур.

Пирометры: радиационные, оптические.

Радиационные – регистрируют интегральное (полное) излучение исследуемого нагретого тела; оптические – излучение тела в каком-либо одном или двух участках спектра.

Радиационная температура – температура абсолютно черного тела, при которой его энергетическая яркость равна энергетической яркости данного тела.

Яркостная температура – температура абсолютно черного тела, при которой его спектральная плотность энергетической яркости для какой-либо определенной длины волны равна спектральной плотности энергетической яркости данного тела.

Цветовая температура – температура абсолютно черного тела, при которой относительные распределения спектральной плотности яркости этого тела и рассматриваемого тела максимально близки в видимой области спектра.

В яркостных пирометрах (с исчезающей нитью) принцип определения температуры основывается на сравнении излучения светящегося тела с излучением абсолютно черного тела на одном и том же фиксированном участке спектра $\Delta\nu$.

Масса и импульс фотона

Гипотеза Планка состоит в том, что свет излучается отдельными порциями (квантами). Энергия одного кванта

$$\varepsilon = h\nu.$$

В дальнейшем квантовые представления о природе света получили развитие в работах Эйнштейна. Изучая явление вырывания электронов с поверхности твердого тела под действием света (явление фотоэффекта), Эйнштейн пришел к выводу, что свет не только излучается, но и распространяется и поглощается в виде отдельных порций (квантов).

Кванты света оптического диапазона были названы фотонами.

Фотоны распространяются со скоростью света ($3 \cdot 10^8$ м/с) и имеют такие же характеристики, как и другие элементарные частицы, а именно они имеют энергию ε , массу m и импульс p .

Энергия фотона:

$$\varepsilon = h\nu; \quad h = 6,62 \cdot 10^{-34} \frac{\text{Дж}}{\text{Гц}}$$

Массу фотона можно определить из формулы Эйнштейна, которая устанавливает связь между массой и энергией.

$$E = mc^2$$

Отсюда:

$$m_{\phi} = \frac{\varepsilon}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2}$$

$$\lambda = cT = \frac{c}{\nu}$$

следовательно: $m_{\phi} = \frac{h}{\lambda c}$ - релятивистская масса фотона

$m_0 = 0$ (масса покоя фотона равна нулю)

Импульс фотона:

$$p = m_{\phi} \cdot c_{\phi} = \frac{h\nu}{c^2} \cdot c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Давление света

Поток монохроматического света частоты ν , падающий нормально на стенку, приносит за 1 с на 1 м^2 энергию E .

$$E = nh\nu$$

где n – число фотонов, равное

$$n = \frac{E}{h\nu}$$

Каждый фотон обладает импульсом $p = \frac{h\nu}{c}$.

Изменение импульса фотона при падении на абсолютно поглощающую поверхность:

$$\Delta p = \frac{h\nu}{c}$$

Импульс, сообщенный стенке площадью 1 м^2 за 1 с :

$$\frac{\Delta P}{\Delta t * S} = \frac{F}{S} = P$$

Давление света:

$$P = \frac{nh \nu}{C} = \frac{E}{C}$$

Давление на полностью отражающую поверхность:

$$P = \frac{2E}{C}$$

Введем коэффициент отражения:

$$R = \frac{N_{\text{отр}}}{N} \leq 1,$$

где N – число падающих фотонов, $N_{\text{отр}}$ – число отраженных фотонов.

Тогда

$$N_{\text{отр}} = R \cdot N ; N_{\text{погл}} = (1 - R) N$$

Отраженные и поглощенные фотоны передадут стенке $S=1 \text{ м}^2$ за 1 с импульс, равный

$$(1 - R) N \frac{h\nu}{c} + RN \frac{2h\nu}{c} = N \frac{h\nu}{c} (1 + R) = \frac{E}{c} (1 + R)$$

Отсюда давление света на поверхность с коэффициентом отражения R

$$P = N \frac{h\nu}{c} (1 + R) = \frac{E}{c} (1 + R)$$

Здесь N - число фотонов падающих в единицу времени на единицу площади; h - постоянная Планка; ν - частота падающего света; E - световая энергия; R - коэффициент отражения.

Кроме квантового существует и волновое объяснение давления света: электрическое поле волны вызывает движение заряженных частиц тела, магнитное поле действует на них с силой Лоренца, которая и создает давление.

Явление фотоэффекта

Фотоэффект – явление испускания электронов веществом под действием света. При взаимодействии фотонов с атомами происходит образование свободных электронов. Различают внешний и внутренний фотоэффект.

Внешний фотоэффект – выход электронов наружу из материала.

Внутренний фотоэффект – сводится к высвобождению электронов под действием света, при этом высвобожденный электрон остается внутри материала, увеличивая тем самым его проводимость.

Вольтамперная характеристика внешнего фотоэффекта

Вольтамперную характеристику внешнего фотоэффекта можно снять с помощью установки, изображенной на рис.

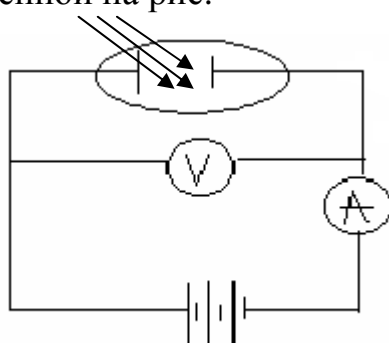


Рис.

Вольтамперная характеристика внешнего фотоэффекта имеет вид (Рис.)

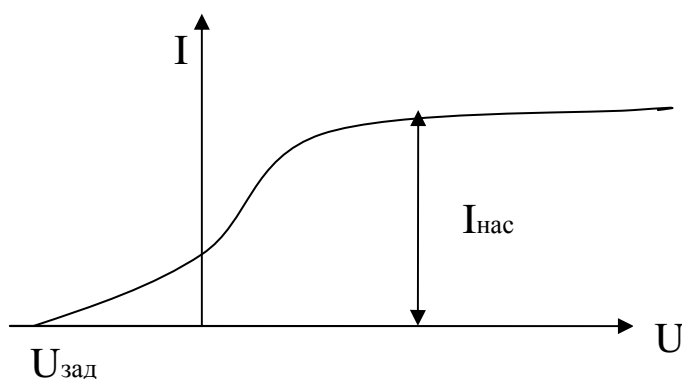


Рис.

Исследуя фотоэффект, Столетов предложил три закона фотоэффекта:

1. Величина фототока насыщения пропорциональна световому потоку:

$$I_{нас} = k \Phi$$

2. Скорость фотоэлектронов, вылетающих с поверхности металла, не зависит от интенсивности света, а зависит от его частоты.

3. Для каждого металла существует минимальная частота, при которой ещё наблюдается внешний фотоэффект и ниже которой он не наблюдается. Эта частота называется красной границей фотоэффекта.

Второй и третий законы никак нельзя объяснить волновой теорией света. Объяснение фотоэффекта на основе квантовой теории дал Эйнштейн.

Эйнштейн теоретически обосновал количественную связь между энергией, получаемой фотоэлектроном при его освобождении светом и частотой этого света

$$h\nu = A_{вых} + \frac{mv^2}{2},$$

где $A_{вых}$ – работа выхода электронов из материала.

Если $v = 0$, т.е. кинетическая энергия фотоэлектрона равна нулю, то:

$$h\nu = A_{вых},$$

соответствующая частота падающего света

$$\nu = \frac{A_{вых}}{h}$$

называется красной границей фотоэффекта. Задерживающий потенциал определяется через работу электрического поля по задерживанию электронов.

$$eU_{зад} = \frac{mV^2}{2}$$

Фотоэффект объясним только с квантовой точки зрения.

Эффект Комптона

С классической точки зрения рентгеновские лучи представляют собой электромагнитные волны. Следовательно, рассеяние рентгеновских лучей должно подчиняться тем же законам, что и рассеяние видимых лучей, т.е. длина волны не должна изменяться.

Комптон, изучая рассеяние рентгеновских лучей на легких атомах, обнаружил изменение длины волны рассеянных лучей.

$$\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$$

Измерение длины волны $\Delta\lambda$ – не зависит ни от длины волны рассеиваемых лучей, ни от материала, но зависит от направления рассеяния.

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\lambda_k \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

Здесь θ – угол рассеяния; λ_k – комптоновская длина волны (величина изменения длины волны при рассеянии под прямым углом).

$$\lambda_k = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ м}$$

Эффект Комптона является результатом упругого столкновения рентгеновского фотона со свободным электроном, при этом фотон передает часть своей энергии и часть импульса. Если первоначально электрон покоился, то законы сохранения энергии и импульса имеют вид:

$$\begin{cases} W_{f_0} + W_{\varepsilon_0} = W_f + W_{\varepsilon} \\ P_{f_0} = P_{\varepsilon} + P_f \end{cases}$$

Здесь $W_{f_0} = h\nu_0 = \frac{\hbar 2\pi C}{\lambda_0} = \hbar k_0 C;$

$$W_f = \hbar Ck; \quad P_{f_0} = \hbar k_0; \quad P_f = \hbar k;$$

$$W_{\varepsilon_0} = m_0 C^2; \quad W_{\varepsilon} = C \sqrt{p_{\varepsilon}^2 + m_0^2 C^2}.$$

Тогда:

$$\hbar k_0 C + m_0 C^2 = \hbar k C + C \sqrt{p^2 + m_0^2 C^2}$$

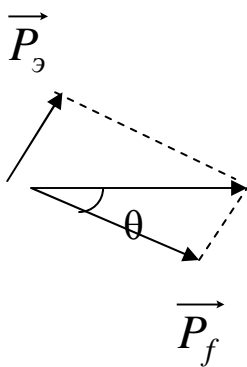
Разделим на C и перепишем в виде:

$$\sqrt{p^2 + m_0^2 C^2} = \hbar(k_0 - k) + m_0 C,$$

Возведем в квадрат:

$$p^2 + m_0^2 C^2 = \hbar^2(k_0^2 + k^2 - 2kk_0) + 2\hbar m_0 C(k_0 - k) + m_0^2 C^2$$

$$\text{Отсюда } p^2 = \hbar^2(k_0^2 + k^2 - 2kk_0) + 2\hbar m_0 C(k_0 - k) \quad (1)$$



Перепишем закон сохранения импульса в скалярной форме с использованием теоремы косинусов.

$$P_0^2 = P_{f0}^2 + P_f^2 - 2P_{f0}P_f \cos \theta$$

или

$$p^2 = \hbar^2 k_0^2 + \hbar^2 k^2 - 2\hbar^2 k k_0 \cos \theta \quad (2)$$

Приравняем (1) и (2)

$$\begin{aligned} \hbar^2(k_0^2 + k^2 - 2kk_0) + 2\hbar m_0 C(k_0 - k) &= \hbar^2(k_0^2 + k^2 - 2kk_0 \cos \theta) \\ 2\hbar m_0 C(k_0 - k) - 2\hbar^2 k_0 k &= -2\hbar^2 k_0 k \cos \theta \\ m_0 C(k_0 - k) &= \hbar k_0 k (1 - \cos \theta) \end{aligned}$$

Разделим на $m_0 C k_0 k$ и умножим на 2π .

$$2\pi \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k_0} \right) = \frac{2\pi \hbar}{m_0 C} (1 - \cos \theta)$$

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 C} (1 - \cos \theta)$$

Обозначим $\lambda_k = \frac{h}{m_0 C}$

Кинетическая энергия электрона отдачи.

$$W_k = \frac{hc}{\lambda \lambda'} (\lambda' - \lambda) = hv \frac{\Delta \lambda}{\lambda + \Delta \lambda} = \frac{2 \frac{\lambda_k}{\lambda} \sin^2 \frac{\theta}{2}}{1 + 2 \frac{\lambda_k}{\lambda} \sin^2 \frac{\theta}{2}} \cdot hv$$

Интерференция и дифракция подтверждают волновую природу света. Тепловое излучение, фотоэффект и эффект Комптона говорят о квантовой или корпускулярной теории света. Следовательно, свет обладает и волновыми и корпускулярными свойствами (корпускулярно-волновой дуализм).

Волновые свойства больше проявляются при распространении и взаимодействии волн друг с другом, а квантовые свойства проявляются при взаимодействии света с веществом.

Квантовые свойства больше проявляются при высоких частотах, а волновые – на низких частотах.

Корпускулярно – волновой дуализм вещества

В 1924 году Луи де Бройль сделал вывод, что двойственная природа (дуализм) характерна не только для света, но и для микрочастиц. При изучении дифракции электронов, электронный пучок вел себя как волна, но только при определенных скоростях электронов в пучке.

Импульс для фотона: $p = m_f \cdot c = \frac{h}{\lambda}$

Импульс для электрона в нерелятивистском приближении ($v \ll c$):

$$p = m_{эл} v_{эл}$$

Формально имеем:

$$\frac{h}{\lambda} = m_{эл} v_{эл}$$

Отсюда, электрону массой $m_{эл}$, летящему со скоростью $v_{эл}$, ставится в соответствие длина волны:

$$\lambda = \frac{h}{m_{эл} v_{эл}} \quad (v \ll c) \text{ формула де Бройля}$$

В релятивистском случае ($v \sim c$) имеем:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_{эл} v_{эл}} \sqrt{1 - \frac{v_{эл}^2}{c^2}}$$

Через кинетическую энергию E_k длина волны де Бройля для нерелятивистского случая ($v \ll c$) записывается как:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E_k}},$$

для релятивистского случая ($v \sim c$):

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{E_k (E_k + 2E_0)}},$$

где $E_0 = m_0 c^2$ - энергия покоя электрона.

Следовательно, каждой частице массой m , летящей со скоростью v , ставится в соответствие длина волны λ .

Опыты К. Девисона и Л. Джермера (1927г.) подтвердили наличие волновых свойств у электрона при отражении электронов от монокристаллов никеля.

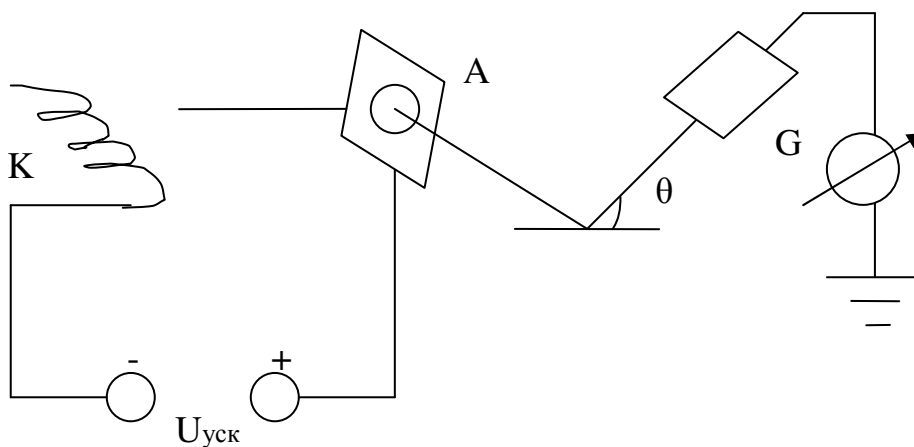


Рис.

Узкий пучок моноэнергетических электронов направлялся на поверхность монокристалла, сошлифованную определенным образом (кубическая решетка, плоскость (111)), отраженные электроны улавливались цилиндрическим электродом, подсоединенным к гальванометру. Интенсивность отраженного пучка оценивалась по силе тока, текущего через гальванометр. Изменялась скорость электронов и угол θ . После отражения пучок электронов имел максимумы, удовлетворяющие условию Вульфа-Брэгга (Рис.).

$$2d \sin \theta = k\lambda (k = 0; 1; 2; \dots)$$

Здесь

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{h}{\sqrt{2meU_{\text{уск}}}}$$

Следовательно:

$$2d \sin \theta = k \frac{h}{\sqrt{2meU_{\text{уск}}}}$$

Отсюда

$$\sqrt{U_{\text{уск}}} = k \frac{h}{2d \sin \theta \sqrt{2me}} = kD,$$

где

$$D = \frac{h}{2d \sin \theta \sqrt{2me}}$$

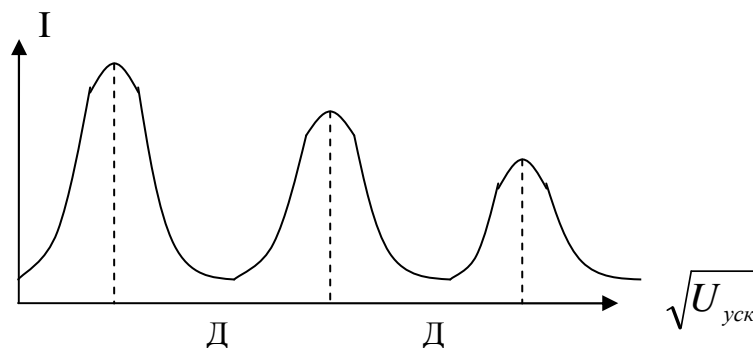


Рис.

В 1927 году Томсон и Тартаковский получили дифракционную картину

при прохождении электронного пучка через тонкую металлическую фольгу. Впоследствии были обнаружены дифракционные картины, полученные с помощью нейтронов, протонов и других частиц, рассеивающихся на кристаллах. Были созданы новейшие, высокоинформативные методы исследования, такие как электронография, нейтронография и др.

Опыты Штерна и Эстермана показали, что волновыми свойствами обладают атомные и молекулярные пучки.

Вывод: любые движущиеся частицы обладают волновыми свойствами, однако, для макрочастиц они не проявляются.

Рассчитаем длину волны, соответствующую пуле ($m = 6\text{г}$), летящей со скоростью $v = 700\text{ м/с}$.

$$\lambda = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{6 \cdot 10^{-3} \cdot 7 \cdot 10^2} = 1,5 \cdot 10^{-34} \text{ м}$$

Здесь для наблюдения волновых свойств летящей пули необходима дифракционная решетка с периодом $\sim 10^{-34}\text{ м}$, которую создать нереально.

Волны де Бройля имеют фазовую и групповую скорость.

Фазовая скорость:

$$V_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar \omega}{\hbar k} = \frac{mc^2}{mv}$$

Учитывая, что $V_{\phi} = \frac{c^2}{v}$ получаем, что фазовая скорость волны де Бройля

больше скорости света. Фазовая скорость волны де Бройля зависит от длины волны, следовательно, эти волны обладают дисперсией:

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi/\lambda} = \lambda\nu$$

Групповая скорость волны де Бройля равна скорости частицы:

$$v_{gp} (v_{гг}) = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dP} = v = v_{(v)}$$

Вывод: частицу нельзя представить как волновой пакет сколь угодно малой протяженности, чтобы избавиться от дуализма (частица есть волна). Т.к.

волна де Бройля обладает дисперсией, то волновой пакет быстро расплывается. Дуализм свойств частиц является объективной закономерностью. Волны де Бройля имеют специфическую природу, не имеющую аналогии среди волн, которые изучаются в классической физике.

Статический смысл волн де Бройля

Любая частица, даже не заряженная, обладает волновыми свойствами. Заряженная частица, двигаясь без ускорения, проявляет себя как волна. Следовательно, волны де Бройля имеют не электромагнитную природу.

Рассмотрим дифракцию электронов. Наличие максимумов (числа электронов) в некоторых точках пространства указывают на максимум интенсивности волны де Бройля. Интенсивность волны пропорциональна квадрату модуля амплитуды.

$$I \sim |A|^2$$

Следовательно, квадрат модуля амплитуды волны де Бройля в данной точке является мерой вероятности того, что частица будет обнаружена в этой точке. В этом проявляется вероятностный или статический смысл волн де Бройля.

$$P(x, y, z) \sim |A|^2$$

Положение частицы в пространстве в данный момент времени определяется заданием волновой функции.

$$\psi = \psi(x, y, z, t) = \psi(\vec{r}, t), \text{ называемой также пси-функцией.}$$

Эта функция имеет вероятностный смысл. Квадрат модуля волновой

функции $|\psi|^2$, умноженный на элемент объема dV , содержащий частицу, определяет вероятность того, что частица будет обнаружена в этом элементе объема dV .

$$dP = |\psi|^2 dV = |\psi|^2 dx dy dz$$

Тогда

$$\rho = \frac{dP}{dV} = \left| \psi(\vec{r}, t) \right|^2 - \text{плотность вероятности.}$$

Плотность вероятности задает вероятность пребывания частицы в данной точке пространства. Здесь

$$|\psi|^2 = \psi \cdot \psi^*$$

ψ^* - функция комплексно сопряженная с ψ .

Интенсивность волны де Бройля

$$I = |\psi|^2 = \psi \cdot \psi^*$$

Условие нормировки

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx dy dz = 1$$

Условие нормировки указывает на то, что пребывание частицы где-либо в пространстве есть достоверное событие и его вероятность должна быть равна единице.

На волновую функцию накладываются следующие условия:

1. Функция ψ должна быть конечной, однозначной и непрерывной.
2. Первые производные $\frac{\partial \psi}{\partial x}$; $\frac{\partial \psi}{\partial y}$; $\frac{\partial \psi}{\partial z}$ должны быть непрерывны.
3. Функция $|\psi|^2$ должна быть интегрируемой, т.е. $\iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx dy dz$

должен иметь конечное значение.

Волновая функция $\psi(x, y, z, t)$ является основной характеристикой состояния микрообъектов (атомов, молекул, элементарных частиц). С её

помощью вычисляется среднее значение некоторой физической величины, характеризующей объект, находящийся в состоянии, описываемом волновой функцией ψ .

$$\langle L \rangle = \iiint_{-\infty}^{+\infty} L |\psi|^2 dx dy dz$$

Уравнение Шрёдингера

Основным уравнением квантовой механики относительно волновой функции $\psi(x,y,z,t)$ является уравнение Шрёдингера. Пусть микрочастица свободно движется вдоль оси X. Согласно гипотезе де Бройля ей соответствует плоская волна

$$\psi = A e^{-i(\omega t - kx)},$$

где $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица

Частота и волновое число волны де Бройля:

$$\omega = \frac{W}{\hbar}; \quad k = \frac{P}{\hbar}$$

где W – полная энергия частицы, P – импульс частицы .

Следовательно

$$\psi = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Wt - Px)}$$

Продифференцируем

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} W \psi; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} P \psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 P^2 \psi$$

Отсюда имеем

$$W = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$P^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\hbar^2 \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

В нерелятивистской механике

$$W_k = \frac{P^2}{2m} = W - U$$

Подставим сюда выражения для W и P

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} - U$$

Умножим на ψ :

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

Или

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \psi \quad \text{— уравнение Шрёдингера}$$

Получение таким путем уравнения Шрёдингера не является строгим. Это уравнение постулируется и его следует рассматривать как исходное соотношение.

Алгоритм решения квантомеханической задачи состоит в следующем: при заданном конкретном виде потенциала $U=U(x,y,z,t)$ определяется волновая функция $\psi(x,y,z,t)$, которая задает состояние частицы и позволяет определить среднее значение любой физической величины.

Трёхмерное уравнение Шредингера имеет вид

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

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - оператор Лапласа (в данном случае в прямоугольной системе координат).

Если силовое поле явно не зависит от времени, т.е. $U=U(x,y,z,t) = U(x,y,z)$, то волновую функцию можно представить в виде:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-\frac{i}{\hbar} W t}$$

Подставим в уравнение Шредингера

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{i}{\hbar} W \right) e^{-\frac{i}{\hbar} W t} \psi$$

$$\Delta \psi = e^{-\frac{i}{\hbar} W t} \Delta \psi$$

$$-i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} W \right) e^{-\frac{i}{\hbar} W t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi e^{-\frac{i}{\hbar} W t} + U \psi e^{-\frac{i}{\hbar} W t}$$

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

Или

$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (W - U) \psi = 0$ (1) - уравнение Шредингера для стационарных состояний

В случае стационарного силового поля плотность вероятности

$$\rho(x, y, z) = \psi \cdot \psi^* = \psi e^{-\frac{i}{\hbar} W t} \cdot \psi^* e^{-\frac{i}{\hbar} W t} = \psi \cdot \psi^* = |\psi|^2 = const$$

от времени не зависит. Следовательно, состояния, описываемые функцией $\Psi = \psi(x,y,z) e^{-\frac{i}{\hbar}Wt}$ являются стационарными.

При заданном конкретном виде потенциала $U=U(x,y,z,t)$ определяется набор функций $\psi = \psi(x,y,z)$ – собственные функции, которые задают состояния микрочастицы и позволяют определить среднее значение любой физической величины. Эти функции существуют лишь при определенных значениях энергии W , которые являются собственными значениями энергии микрочастицы. Совокупность собственных значений энергии образует энергетический спектр частицы. Если U - монотонная функция и $U \rightarrow 0$ на бесконечности, то в области, где $W < 0$ собственные значения энергии образуют дискретный спектр.

Основная задача квантовой механики – отыскание собственных функций и собственных значений энергии.

Решение уравнения Шрёдингера для свободной частицы

При свободном движении частицы $U=0$ и её энергия W совпадает с кинетической энергией. Рассмотрим одномерную задачу. Пусть вектор скорости частицы направлен вдоль оси Ox . Уравнение (1) приобретет вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} W \psi = 0$$

Или

$$\psi_{xx} + k^2 \psi = 0 \quad (2)$$

где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} W$ – волновое число

Решение уравнения (2)

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

где A, B – некоторые постоянные.

Временное уравнение Шредингера в этом случае будет иметь решение:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x) e^{-i\omega t} = A e^{-i(\omega t - kx)} + B e^{-i(\omega t + kx)} =$$

$$A \exp \left[-i \left(\frac{W}{\hbar} t - \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar} x \right) \right] + B \exp \left[-i \left(\frac{W}{\hbar} t + \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar} x \right) \right] =$$

$$= \psi_1 + \psi_2 -$$

- суперпозиция двух плоских монохроматических волн равной частоты

$\omega = \frac{W}{\hbar}$, распространяющихся одна в положительном направлении с

амплитудой А, другая – в отрицательном направлении оси X с амплитудой В.

Следовательно: свободная частица в квантовой механике описывается плоской монохроматической волной де Бройля с волновым числом

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW}$$

Вероятность обнаружить частицу

$$\rho(x) = |\psi_1|^2 = |A|^2$$

постоянна для всех точек пространства.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга

В классической механике состояние частицы определяется динамическими переменными: координатами, импульсом, энергией. В квантовой механике состояние частицы описывается волновой функцией $\psi(x, y, z, t)$. В строгом смысле к микрочастице нельзя применять динамические переменные из-за наличия у неё волновых свойств. В классической физике тоже существуют определенные ограничения в применении некоторых понятий

к определенным объектам, например, понятие температуры неприменимо к одной молекуле. В квантовой механике волна не имеет определенной локализации (координаты) в пространстве. В классической механике определенному значению координаты частицы соответствуют точные значения её скорости и импульса. В квантовой механике существуют ограничения в возможности одновременного точного определения координаты частицы и величины её импульса.

1. Измерение координаты свободной микрочастицы

Определим значение координаты свободно летящей микрочастицы, поставив на её пути щель шириной Δx , перпендикулярно направлению движения частицы. В результате будет наблюдаться дифракция электронов на щели.

До прохождения частицы через щель её составляющая импульса имеет точное значение $\Delta p_x = 0$ (т. к. щель перпендикулярна к направлению импульса), но координата частицы x является неопределённой.

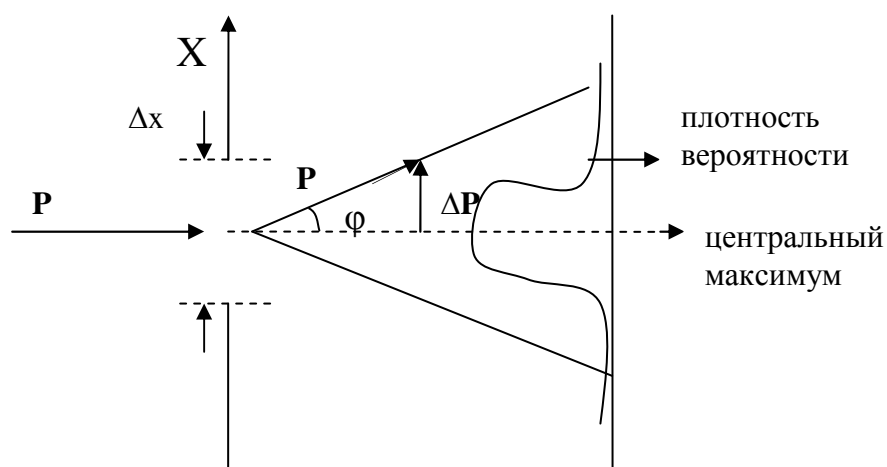


Рис.

При прохождении через щель имеем: Δx – неопределенность координаты (ширина щели); $\Delta p = p \sin \varphi$ – неопределенность импульса. Частица может попасть в любую точку, где плотность вероятности $\rho(x)$ отлична от нуля. Рассмотрим центральный дифракционный максимум, для которого

$$\sin \varphi = \frac{\lambda}{\Delta x}$$

φ – угол, соответствующий первому дифракционному минимуму.

Следовательно:

$$\Delta p_x = p \frac{\lambda}{\Delta x}$$

Учитывая, что

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

Имеем:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = \lambda p = 2\pi\hbar$$

Соотношение неопределенностей Гейзенберга (более строгое):

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar ;$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar ;$$

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

Соотношение неопределенностей указывает, в какой мере можно пользоваться понятиями классической механики применительно к микрочастицам, в частности, с какой степенью точности можно говорить о траекториях микрочастиц. Движение по траектории характеризуется вполне определенными значениями координат и скорости в любой момент времени:

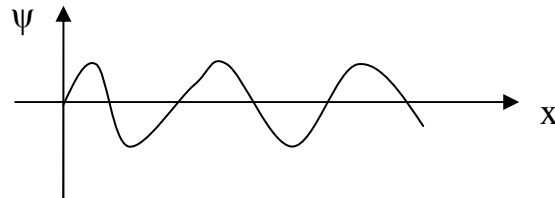
$$\Delta x \cdot m \Delta V_x \geq \hbar ;$$

$$\Delta x \Delta V_x \geq \frac{\hbar}{m}$$

Чем больше масса частицы, тем меньше неопределенность её координаты и скорости, тем с большей точностью применимы к ней классические понятия.

Измерение координаты с волновой точки зрения

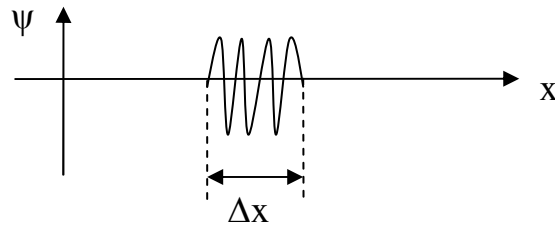
1. До щели



монохроматическая

волна; $\Delta x = \infty$

2. В щели



Волновой пакет – немонахроматическая волна - совокупность монохроматических волн. Чем уже волновой пакет, тем шире спектр пространственных частот.

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar ;$$

$$\Delta x \frac{\Delta p_x}{\hbar} \geq 1$$

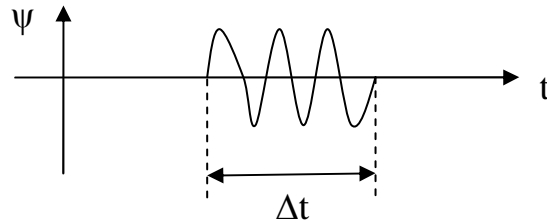
$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 1$$

Следовательно:

$$\Delta x \frac{2\pi}{\Delta \lambda} \geq 1;$$

$$\Delta \lambda \leq 2\pi \cdot \Delta x$$

Неопределенность энергии



Δt – временная ширина волнового пакета

Следовательно:

$$\Delta \omega \cdot \Delta t \geq 1$$

где $\Delta \omega$ – ширина спектра временных частот.

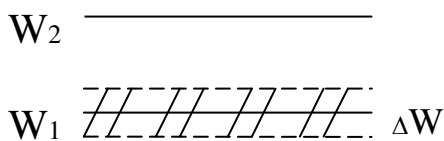
$$\frac{\Delta W}{\hbar} \Delta t \geq 1; \quad \Delta W \cdot \Delta t \geq \hbar$$

соотношение неопределенностей для энергии и времени

Энергия микрочастиц принимает собственные значения: частица в определенном состоянии обладает определенной энергией – находится на энергетическом уровне. Если она находится на уровне в течение времени Δt , то ширина уровня энергии

$$\Delta W \geq \frac{\hbar}{\Delta t}$$

Энергия частицы в данном состоянии может быть определена тем точнее, чем дольше частица находится в этом состоянии.



Принцип причинности

В классической механике существует так называемый **механический детерминизм**: по известным значениям координат x_0, y_0, z_0 и проекций скорости V_{x0}, V_{y0}, V_{z0} в момент времени t_0 можно определить координаты x, y, z и проекции скорости V_x, V_y, V_z в любой последующий момент времени t с помощью уравнения движения.

В квантовой механике нельзя в любой момент времени одновременно точно указать положение частицы и её скорость. Нельзя этого сделать и в последующие моменты времени. Однако, нарушения принципа причинности не происходит. Квантовая механика имеет статистический характер. Она не позволяет точно определить положение частицы или траекторию. Состояние частицы определяется полностью волновой функцией ψ . При этом соблюдается принцип причинности: по известной Ψ_0 - функции в момент времени t_0 с помощью уравнения Шредингера можно определить ψ в любой последующий момент времени t и тем самым полностью задать состояние частицы.

В классической механике

$$\left. \begin{matrix} x_0, y_0, z_0 \\ V_{x0}, V_{y0}, V_{z0} \\ t_0 \end{matrix} \right\} \xrightarrow{\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = \Sigma \vec{F}} \left\{ \begin{matrix} x, y, z \\ V_x, V_y, V_z \\ t \end{matrix} \right.$$

В квантовой механике

$$\Psi_0(x_0, y_0, z_0) \xrightarrow{\text{уравнение Шредингера}} \Psi(X, Y, Z)$$

Прохождение частиц через потенциальный барьер. Туннельный эффект

Пусть частица движется в направлении оси X и имеет энергию W и встречает на своем пути барьер высотой U_0 и шириной ℓ (Рис.).

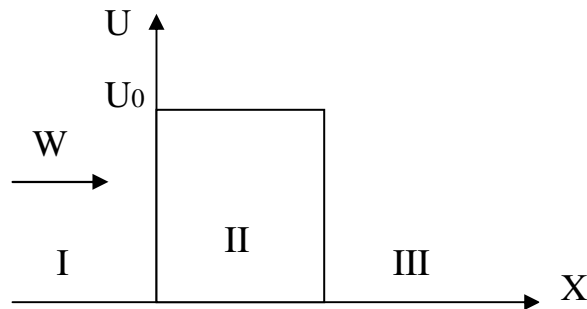


Рис.

Согласно классическим представлениям

1. Если $W > U_0$ - частица перейдет в область III
2. Если $W < U_0$ - частица отразится от потенциального барьера и останется в области I.

В квантовой механике:

1. Если $W > U_0$ - есть вероятность отражения от потенциального барьера.
2. Если $W < U_0$ - есть вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер.

Рассмотрим случай, когда энергия частицы $W < U_0$.

В области I и III имеем

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} W \psi = 0 \quad (1)$$

В области II

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - U_0) \psi = 0 \quad (2)$$

(1) и (2) – стационарные уравнения Шредингера (однородные дифференциальные уравнения с постоянными коэффициентами). Будем искать решение уравнения (1) и (2) в виде

$$\psi = e^{-\lambda x}$$

Характеристическое уравнение для (1)

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2} W = 0 \quad (3)$$

Характеристическое уравнение для (2)

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (W - U_0) = 0 \quad (4)$$

Из (3) имеем

$$\lambda = \pm i\alpha$$

где $\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mW}$

Из (4) имеем:

$$\lambda = \pm \beta$$

где $\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)}$

Следовательно:

Для области I

$$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}$$

Для области II

$$\psi_2 = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}$$

Для области III

$$\psi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x}$$

Рассмотрим ψ_1

$$\psi_1 = A_1 e^{-i(\omega t - \alpha x)} + B_1 e^{-i(\omega t + \alpha x)} = \psi_{1 \text{ пад}} + \psi_{1 \text{ отр}}$$

Для области II невозможен рост амплитуды волны $A_2 \leq B_2$ - следовательно:

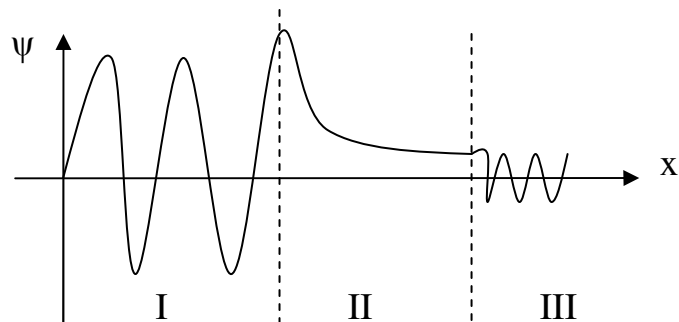
$$\psi_2 = B_2 e^{-\omega t} \cdot e^{-\beta x}$$

затухающая волна

Для области III

$B_3 = 0$ (т.к. нет отраженной волны), следовательно:

$$\psi_3 = A_3 e^{-i(\omega t - \alpha x)}$$



Явление прохождения частицы через потенциальный барьер называется туннельным эффектом. Прозрачностью (коэффициентом прозрачности) D потенциального барьера называется величина

$$D = \frac{I_{\text{прох}}}{I_{\text{пад}}}$$

$I_{\text{прох}}$ - интенсивность волны де Бройля, прошедшей сквозь потенциальный барьер;

$I_{\text{пад}}$ - интенсивность волны, падающей на барьер.

Следовательно:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

$$R = \frac{I_{\text{отр}}}{I_{\text{пад}}}$$

коэффициент отражения:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$$

Причем:

$$R + D = 1$$

Для прямоугольного потенциального барьера высотой U_0 и шириной ℓ :

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{(U_0 - W)2m} \ell\right); D_0 \sim 1$$

Для потенциального барьера произвольной формы:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U_0 - W)} dx\right)$$

где x_1 и x_2 координаты начала и конца потенциального барьера для данного значения энергии (Рис.).

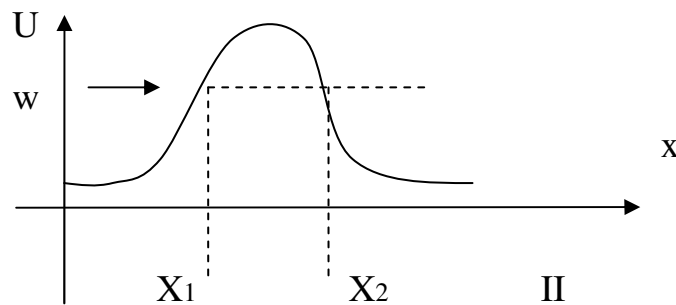


Рис.

Увеличение массы микрочастицы, разности $(U-W)$, и ширины барьера приводит к уменьшению прозрачности барьера.

С классической точки зрения туннельный эффект невозможен, т.к. в области II кинетическая энергия

$$T = W - U_0 < 0$$

Рассмотрим туннельный эффект с квантовой точки зрения. Пусть частица

находится в области II.

Неопределенность импульса при этом

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x}$$

Барьер проникаем, если:

$$D \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - W)} \frac{\Delta x}{2} \right] \sim e^{-1}$$

$$\frac{1}{\hbar} \left[\sqrt{2m(U_0 - W)} \Delta x \right] \sim 1$$

Отсюда

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - W)}}$$

Следовательно:

$$\Delta p_x \geq \sqrt{2m(U_0 - W)}$$

$$\Delta T = \frac{\Delta p_x}{2m} \geq U_0 - W \quad - \text{неопределенность кинетической энергии}$$

превышает высоту барьера.

Применение – туннельные микроскопы, основанные на автоэлектронной эмиссии, туннельные диоды.

Гармонический осциллятор.

Гармонический осциллятор – это частица, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы $F = -kx$. Потенциальная энергия такой частицы:

$$U = \frac{kx^2}{2}$$

Учитывая, что $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ имеем $U = \frac{m \omega^2 x^2}{2}$

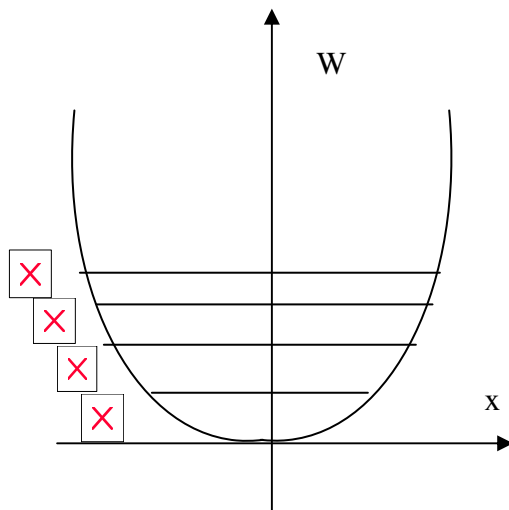
Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(W - \frac{m \omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0$$

Это уравнение имеет конечные, однозначные и непрерывные решения при значениях

$$W = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

При $n=0$ $W_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$ - нулевых колебаний.



Квантовая механика позволяет вычислить вероятности различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое. Для гармонического осциллятора возможны лишь такие переходы, при которых $\Delta n = \pm 1$ - правило отбора.

Ядерная модель атома Резерфорда.

Резерфорд исследовал рассеяние α -частиц (He^{++}) при прохождении их

через тонкую металлическую фольгу. На основании результатов опытов им была предложена ядерная модель атома. Атом состоит из:

1. центрального ядра, размером $10^{-15} - 10^{-14}$ м, в котором сосредоточен весь положительный заряд и практически вся масса атома.
2. электронной оболочки, размер которой $\approx 10^{-10}$ м.
3. электроны движутся по орбитам, зависящим от энергии электронов (так называемая орбитальная модель атома).

С точки зрения классической физики:

1. электрон должен непрерывно излучать электромагнитные волны.

Уравнение движения электрона по кривой орбите радиуса $r \sim 10^{-10}$ м со скоростью $V \sim 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ под действием силы Кулона имеет вид:

$$\frac{mV^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r^2}$$

Отсюда ускорение электрона:

$$a = \frac{V^2}{r} \sim 10^{22} \frac{\text{м}}{\text{с}^2}$$

А заряженная частица, движущаяся с ускорением, излучает электромагнитные волны.

2. атом неустойчив; электрон, теряя энергию за счет излучения, уменьшает скорость, приближается по спирали к ядру.

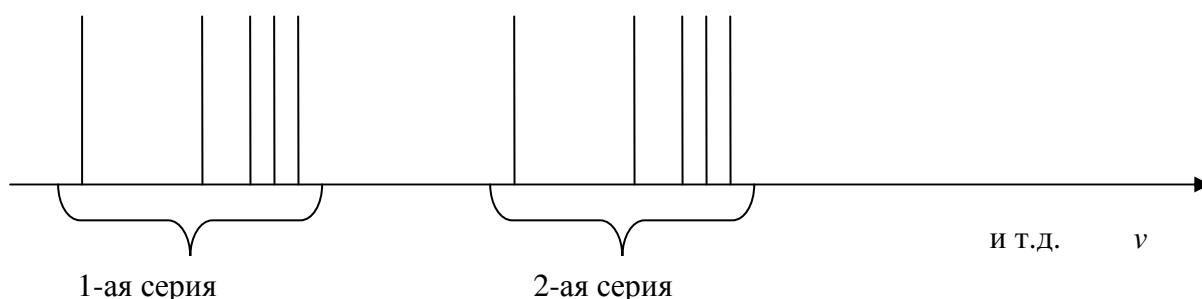
3. при изменении скорости и радиуса орбиты меняется ускорение электрона и, следовательно, частота излучения. Спектр излучения электрона непрерывен.

В действительности:

1. Атом устойчив
2. Атом излучает энергию лишь при определенных условиях.
3. Излучение атома имеет линейчатый спектр, обусловленный строением его электронной оболочки.

Излучение атомов. Спектральные серии.

Рассмотрим спектры излучения изолированного атома водорода, состоящего из одного протона и одного электрона, и водородоподобных атомов. Водородоподобными являются атомы, имеющие ядро с зарядом Ze и один электрон. Из опыта известно, что спектры излучения таких атомов состоят из отдельных линий, т.е. имеют линейчатую структуру. Эти линии расположены не беспорядочно, а группируются в серии.



Расстояние между линиями в серии закономерно убывает по мере перехода от более длинных волн к более коротким (или по мере возрастания частоты).

Бальмер нашел эмпирическую формулу для известных линий в спектре излучения атома водорода в видимой области:

$$\lambda^{-1} = R' \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (1)$$

где $R' = 1,097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ - постоянная Ридберга

$n = 3, 4, 5, \dots$

Для частот имеем:

$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (2)$$

$R = c \cdot R' = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ Гц}$ - постоянная Ридберга

Группа линий в спектре излучения, определяемая формулой (1) и (2) при различных значениях n называется серией Бальмера.

При $n \rightarrow \infty$ $\nu_n \rightarrow \nu_{n-1}$ - линии в серии сближаются.

Граница серии Бальмера ($n=\infty$)

$$\lambda_{\text{гр}} = \left(\frac{R'}{2^2} \right)^{-1} \approx 3,645 \cdot 10^{-7} \text{ м}$$

$$\nu_{\text{гр}} = \frac{R}{2^2} \sim 8,25 \cdot 10^{14} \text{ Гц}$$

В спектре излучения атома водорода имеются еще несколько серий.

Ультрафиолетовая область спектра ^ серия Лаймана

$$\nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2; 3; 4; \dots$$

Инфракрасная область спектра:

Серия Пашена

$$\nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4; 5; 6; \dots$$

Серия Брэкета

$$\nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5; 6; 7; \dots$$

Серия Пфунда

$$\nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 6; 7; 8; \dots$$

Серия Хемфри

$$\nu = R \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 7; 8; 9; \dots$$

Обобщая, можно частоты всех линий спектра водородного атома представить одной формулой

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = m + 1; m + 2; \dots$$

Или

$$\nu = T(m) - T(n),$$

где n и m – целые числа; функции $T(m)$ и $T(n)$ – спектральные термы. Для определенной серии $m = \text{const}$, а изменение n дает все линии серии.

Принцип Ритца: частоты спектральных линий атома могут быть представлены в виде разности двух термов, различные комбинации термов дают все возможные частоты спектра излучения атома.

Для серии Бальмера:

$$T(m) = \frac{R}{2^2}; \quad T(n) = \frac{R}{n^2}; \quad \text{при } n \rightarrow \infty \quad T(n) \rightarrow 0,$$

следовательно $T(m) = \frac{R}{2^2}$ - граница серии.

Для водородоподобного атома терм имеет вид:

$$T(n) = \frac{Z^2 R}{n^2}$$

Выводы:

1. Энергия излучаемого фотона $W = h\nu$, В соответствии с принципом Ритца: $h\nu = h[T(m) - T(n)]$, следовательно можно предположить

$hT(m) = W_m$; $hT(n) = W_n$ - энергия атома в определенном состоянии.

2. $T(m) = \frac{R}{m^2}$ и $W_m = \left| \frac{hRz^2}{m^2} \right|$ - энергия атома принимает

дискретные значения, т.е. квантована.

Постулаты Бора

Задача: связать закономерности линейчатых спектров с ядерной моделью атома и с квантовым характером излучения и поглощения света.

Бор в 1913г. предложил классическое описание поведения электрона в атоме дополнить некоторыми постулатами, которые регламентируют поведение электрона.

Первый постулат Бора (постулат стационарных состояний) : существуют стационарные состояния атома, находясь в которых он не излучает. (Есть стационарные орбиты, при движении по которым электрон не излучает).

Правило квантования орбит - в стационарном состоянии для электрона в атоме возможны лишь такие орбиты, на которых момент импульса удовлетворяет условию.

$$L_n = m_e V_e r = n \hbar ,$$

т.е. момент импульса квантован ($n=1,2,3,\dots$)

$$n = \frac{2 \pi r}{\lambda} = \frac{2 \pi r m_e V_e}{\hbar} \quad - \text{ число длин волн де Бройля, указывающихся}$$

на длине орбиты.

Классическое представление. Орбитальное движение электрона обеспечивает кулоновское взаимодействие. Следовательно, уравнение движения электрона:

$$\frac{m V^2}{r} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r^2}$$

Отсюда:

$$\frac{m V^2 r^2}{m r r^2} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r^2} \quad \text{или} \quad \frac{m V^2 r^2}{m r} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0}$$

$$L^2 = \frac{Ze^2 mr}{4\pi\epsilon_0}$$

$$n^2 \hbar^2 = \frac{Ze^2 mr_n}{4\pi\epsilon_0}$$

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Ze^2 m} \quad (n=1,2,3,\dots) \text{ - правило квантования орбит.}$$

При $n=1$ $r_1 = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Ze^2 m} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ - первый

Боровский радиус.

Квантование энергии

$$W = W_{\text{кин}} + W_{\text{пот}} = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Подставим выражение для радиуса:

$$W_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \quad (n=1,2,3,\dots) \text{ - энергия принимает дискретные}$$

значения, т. е. квантована.

Второй постулат Бора (правило частот) – при переходе атома из одного стационарного состояния в другое испускается или поглощается квант энергии:

$$h \nu_{nm} = W_n - W_m$$

Если $W_m < W_n$ - переход электрона на менее удаленную орбиту –

квант энергии излучается; $W_m > W_n$ - квант энергии поглощается.

Учитывая обобщенную формулу Бальмера:

$$W_n = -R \frac{hZ^2}{n^2} \quad \text{- энергия атома квантована.}$$

Следовательно:

$$R = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2}$$

n – главное квантовое число, определяет квантованные значения энергии.

Состояние с $n=1$ называется основным, при $n>1$ – возбужденное.

Первый потенциал возбуждения

$$\varphi_1 = \frac{W_2 - W_1}{e}, \text{ второй потенциал возбуждения } \varphi_2 = \frac{W_3 - W_1}{e} \text{ и}$$

т.д.

За счет притяжения электрона его энергия в атоме $W_n < 0$.

$|W_n|$ - энергия связи электрона в атоме.

Наибольшее значение $W_n = 0$ при $n \rightarrow \infty$ соответствует ионизации атома, т.е. отрыву от него электрона. Потенциал ионизации атома водорода или водородоподобного иона в состоянии с главным квантовым числом n равен

$$\varphi = \frac{Z^2 R h}{en^2}$$

Экспериментальное подтверждение постулатов Бора.

Существование дискретных энергетических уровней атома подтвердили опыты Франка и Герца при исследовании столкновения электронов с атомами ртути (давление паров ртути $\sim 0,1$ мм рт.ст.).

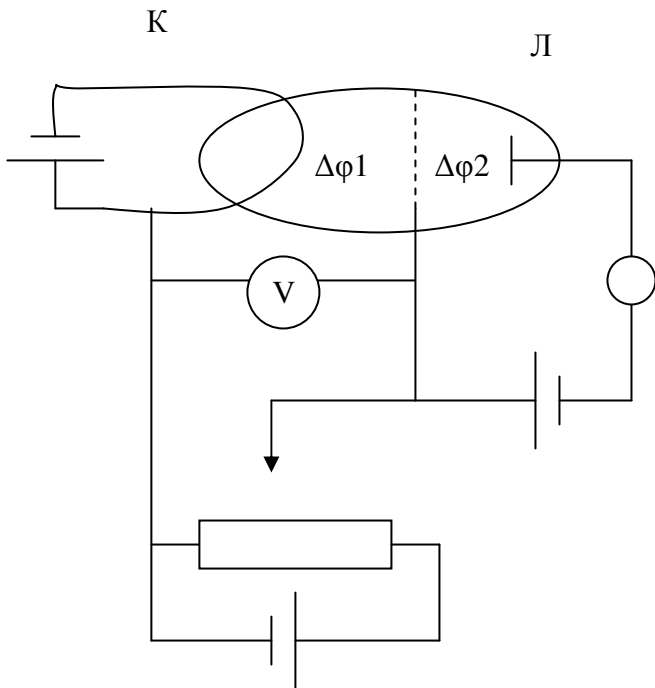


Рис.

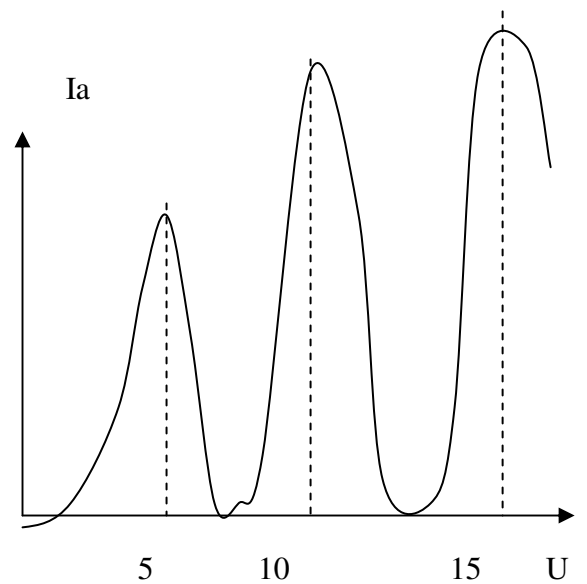


Рис.

U – напряжение между анодом и сеткой, I_a – анодный ток.

При $W = e\Delta\varphi = k \cdot 4,86 \text{ эВ}$ происходит уменьшение анодного тока. Это объясняется неупругими столкновениями электронов с атомами, при которых происходит передача энергии атому и атом переходит из основного состояния с энергией W_1 в возбужденное состояние с энергией W_2 . При $k=1$ переходит один атом, при $k=2$ – столкновение электрона с двумя атомами и т.д.

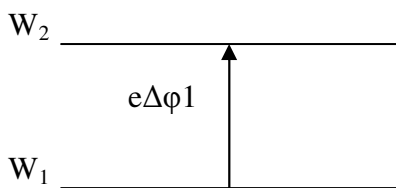


Рис.

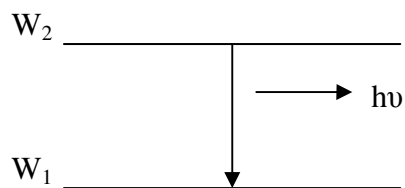


Рис.

Атомы ртути при переходе из возбужденного состояния в основное излучают спектральную линию

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta W} = \frac{6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{4,86 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 2,537 \cdot 10^{-7} \text{ м}$$

$$\Delta W = W_2 - W_1 = 4,86\text{эВ}$$

Достоинства теории Бора:

1. Вычисление постоянной Ридберга

2. Вычисление $\frac{m_p}{m_e} = 1847$

3. Нахождение $\frac{e}{m_e}$ - удельного заряда электрона.

Недостатки:

1. Невозможность создать теорию атома гелия и других атомов, имеющих более одного электрона.

2. Невозможность определить интенсивность спектральных линий.

Водородоподобная система в квантовой механике

Водородоподобная система (водородоподобные атомы) – это положительно заряженное ядро (Ze) и движущийся вокруг него электрон ($H; He^+; Li^{++}$ и т.д.)

В этом случае потенциальная энергия кулоновского взаимодействия:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Таким образом, силовое поле, в котором движется электрон, является центрально-симметричным. Стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

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

Вспользуемся сферической системой координат, в которых $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$. Стационарное уравнение Шредингера в сферических координатах $x = r \sin \theta \cos \varphi, y = r \sin \theta \sin \varphi, z = r \cos \theta$ имеет вид:

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

Уравнение (2) имеет однозначные, конечные и непрерывные решения в двух случаях: либо при $W > 0$; либо при дискретных значениях $W < 0$, равных

$$W_n = - \frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \quad - \text{собственные значения энергии.}$$

$W > 0$ – соответствует свободному электрону, т.е. не связанному с ядром.

$W < 0$ – соответствует электрону, связанному с ядром.

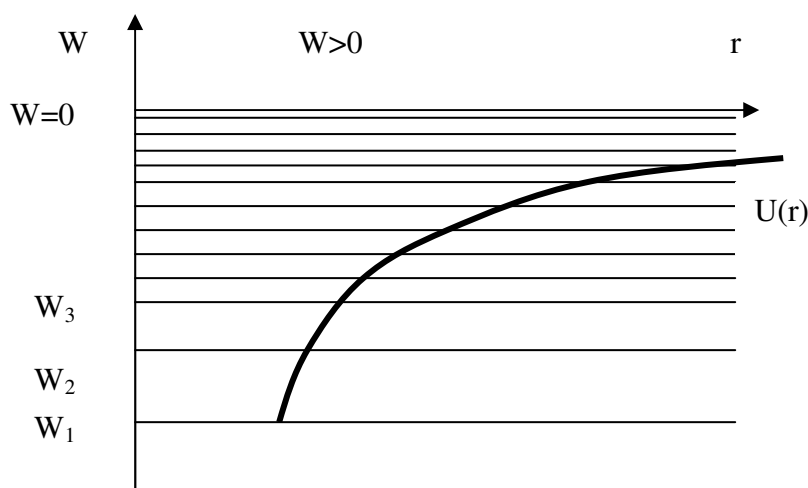


Рис.

W_1 – основной энергетический уровень.

W_2, W_3, \dots - возбужденные энергетические уровни.

$$\Delta \varphi_i = - \frac{W_1}{e} \quad - \text{потенциал ионизации}$$

$$\Delta \varphi_n = \frac{W_n - W_1}{e} \quad - \text{потенциал возбуждения.}$$

Квантовые числа

Собственные функции, являющиеся решением уравнения (2) содержат три целочисленных параметра n, l, m ,

$$\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

1. Главное квантовое число $n=1, 2, 3, \dots$ - определяет номер уровня энергии. Состояния с одинаковой энергией W_n , но с различными волновыми функциями ψ_{nlm} , отличающиеся значениями l и m называются вырожденными; число различных состояний с каким-либо значением энергии называется кратностью вырождения.

2. Орбитальное квантовое число $l=0;1;2;\dots; n-1$ - определяет механический момент импульса электрона

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

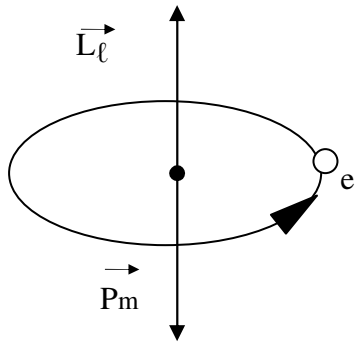
Состояния с различными числами l имеют обозначения

	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
	s	p	d	f
$n=1$	1s	-	-	-
$n=2$	2s	2p	-	-
$n=3$	3s	3p	3d	-
$n=4$	4s	4p	4d	4f

3. Магнитное квантовое число - $m=-l; -l+1; \dots; 0; 1; \dots$ l - определяет проекцию момента импульса электрона на заданное направление.

$$L_{lz} = \hbar m$$

С орбитальным механическим моментом электрона L_l связан магнитный момент

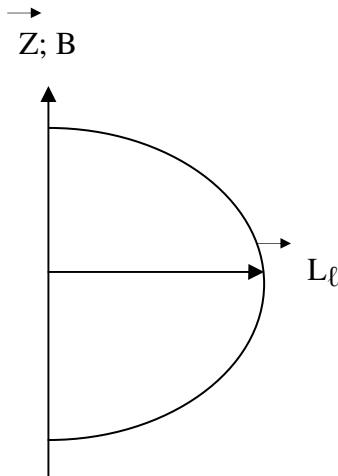


$$P_m = -\gamma L_l$$

Здесь $\gamma = \frac{e}{2m_e}$ - гиромагнитное отношение.

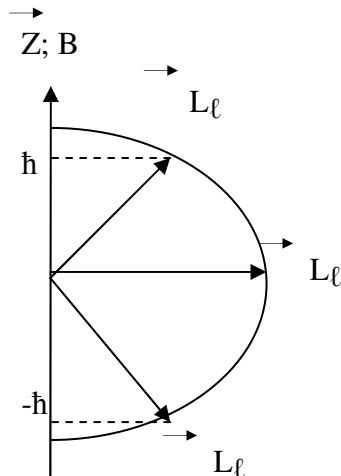
Проекция магнитного момента P_{mz} и, следовательно, и момента импульса электрона на направление внешнего магнитного поля Z принимает квантованные значения, кратные \hbar .

$$P_{mz} = \frac{e\hbar}{2m_e} m; \quad \frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_B \quad - \text{ магнетон Бора.}$$



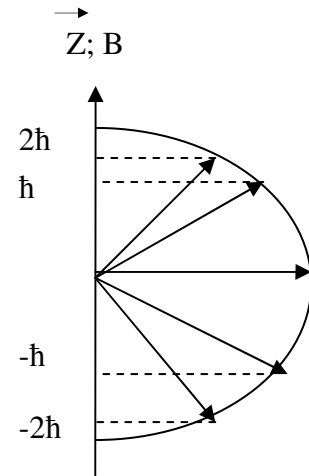
s – электрон
 $l=0$
 $m_l=0$

Рис.



p – электрон
 $l=1$
 $m_l=0; \pm 1$

Рис.



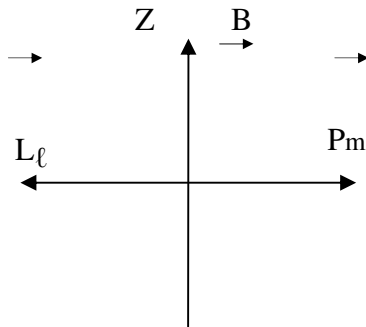
d – электрон
 $l=2$
 $m_l=0; \pm 1; \pm 2$

Рис.

Опыты Штерна и Герлаха.

Спин электрона.

В 1921г. Штерн и Герлах обнаружили, что атомный пучок, содержащий электроны в S-состоянии, в неоднородном магнитном поле расщепляется на два пучка.



$$\frac{d\vec{B}}{dZ} \neq 0$$

Рис.

На атом действует сила $F = P_{mz} \cdot \frac{dB}{dZ}$, т.к. $l=0$, следовательно $m_l=0$ и

$P_{mz} = \gamma L_{lz} = 0$ и атомный пучок не должен расщепляться. Следовательно, у электрона есть магнитный момент, не обусловленный орбитальным движением. Уленбек и Гаудсмит предположили, что электрон обладает собственным механическим моментом импульса – спином. Спин – неотъемлемое свойство частицы, как заряд и масса. Спино соответствует магнитный момент

$$\vec{P}_{ms} = -\gamma_s \vec{L}_s$$

Здесь $\gamma_s = \frac{e}{m_e}$ - спиновое гиромангнитное отношение.

Спин квантуется по закону:

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

S – спиновое квантовое число.

Проекция спина L_s на направление внешнего магнитного поля Z

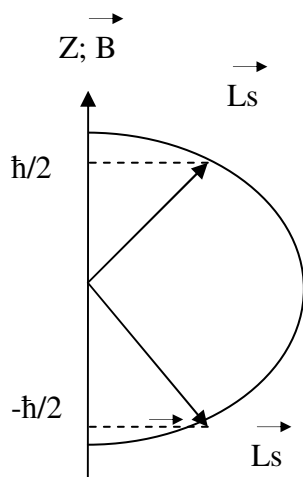
квантована

$$L_{sz} = m_s \hbar$$

m_s - магнитное спиновое число. Для электрона $S=1/2$; $m_s = \pm 1/2$.

$$L_s = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

$$L_{sz} = \pm \frac{\hbar}{2}$$



Состояние электронов. Принцип Паули

Для полного описания состояния электрона в атоме необходимо задать четыре квантовых числа: n ; l ; m ; m_s . Частицы с $S=1/2$ (с полуцелым спином) называются фермионами.

Принцип Паули: два фермиона не могут одновременно находиться в одном состоянии.

Для электронов в атоме принцип Паули: два электрона в любом атоме не могут находиться в одном стационарном состоянии, определяемым одинаковым набором квантовых чисел: n ; l ; m ; m_s .

$$Z_1(n, l, m, m_s) = 0 \text{ или } 1$$

Т.к. $m_s = \pm \frac{1}{2}$, то $Z_2(n, l, m) = 2$

Т.к. $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$, т.е. имеет $(2l+1)$ значение, то

$$Z_3(n, l) = 2(2l + 1)$$

Т.к. $l = 0, 1, \dots, n-1$, т.е. имеет n значений, то

$$Z(n) = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2 \quad - \quad \text{число электронов на одном}$$

энергетическом уровне.

Заданные квантовые числа	n, l, m, m_s	n, l, m	n, l	n
Максимальное число электронов	1	2	$2(2l+1)$	$2n^2$

Совокупность электронов, имеющих одинаковые значения n , образуют слои. Слои обозначаются следующим образом:

	К	L	M	N	O	P	Q	...
$n =$	1	2	3	4	5	6	7	

Слои подразделяются на оболочки, отличающиеся значением орбитального квантового числа l

		l	0	1	2	3	4	
		n	оболочки					
			s	p	d	f	g	Всего электронов
слои	1	К	2	-	-	-	-	2
	2	L	2	6	-	-	-	8
	3	M	2	6	10	-	-	18
	4	N	2	6	10	14	-	32
	5	O	2	6	10	14	18	50

Периодическая система элементов Менделеева.

Объяснение построения периодической системы Менделеева основывается на следующих положениях:

1. Порядковый номер Z равен числу электронов в атоме элемента.
2. Распределение электронов атоме подчиняется принципу минимума электронной энергии: сначала заполняются состояния с меньшей энергией.
3. Должен выполняться принцип Паули.

Электронная конфигурация элементов имеет вид: nS^z ; Z – число электронов в оболочке, n – номер слоя.

Для $14N - 1S^2 2S^2 2p^3$

Сначала заполняется слой с меньшим числом n . Внутри слоя сначала заполняется оболочка с меньшим числом l .

В реальной системе Менделеева начиная с ($Z=19$) энергия уровня с большим номером может быть меньше энергии уровня с меньшим номером, т.е.

$W(n_2 l_2) < W(n_1 l_1)$ при $n_2 > n_1$ и $l_2 > l_1$, но это является исключением.

Спектры атомов.

Изолированные атомы дают спектры излучения в виде отдельных линий (Рис.), при этом:

1. Испускание и поглощение света происходит при переходе электрона с

одного энергетического уровня на другой.

$$h \nu_{nm} = W_n - W_m = \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R Z^2 h \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

2. Должно выполняться правило отбора $\Delta l = \pm 1$, т.е. возможны только такие переходы, при которых l меняется на единицу.

Следовательно: возможны переходы:

для серии Лаймана $n p \rightarrow 1s$ ($n = 2; 3; \dots$),

для серии Бальмера $n p \rightarrow 2s$; $n s \rightarrow 2p$; $n d \rightarrow 2p$ ($n = 3; 4; \dots$)

3. Должно выполняться правило отбора $\Delta m = 0; \pm 1$

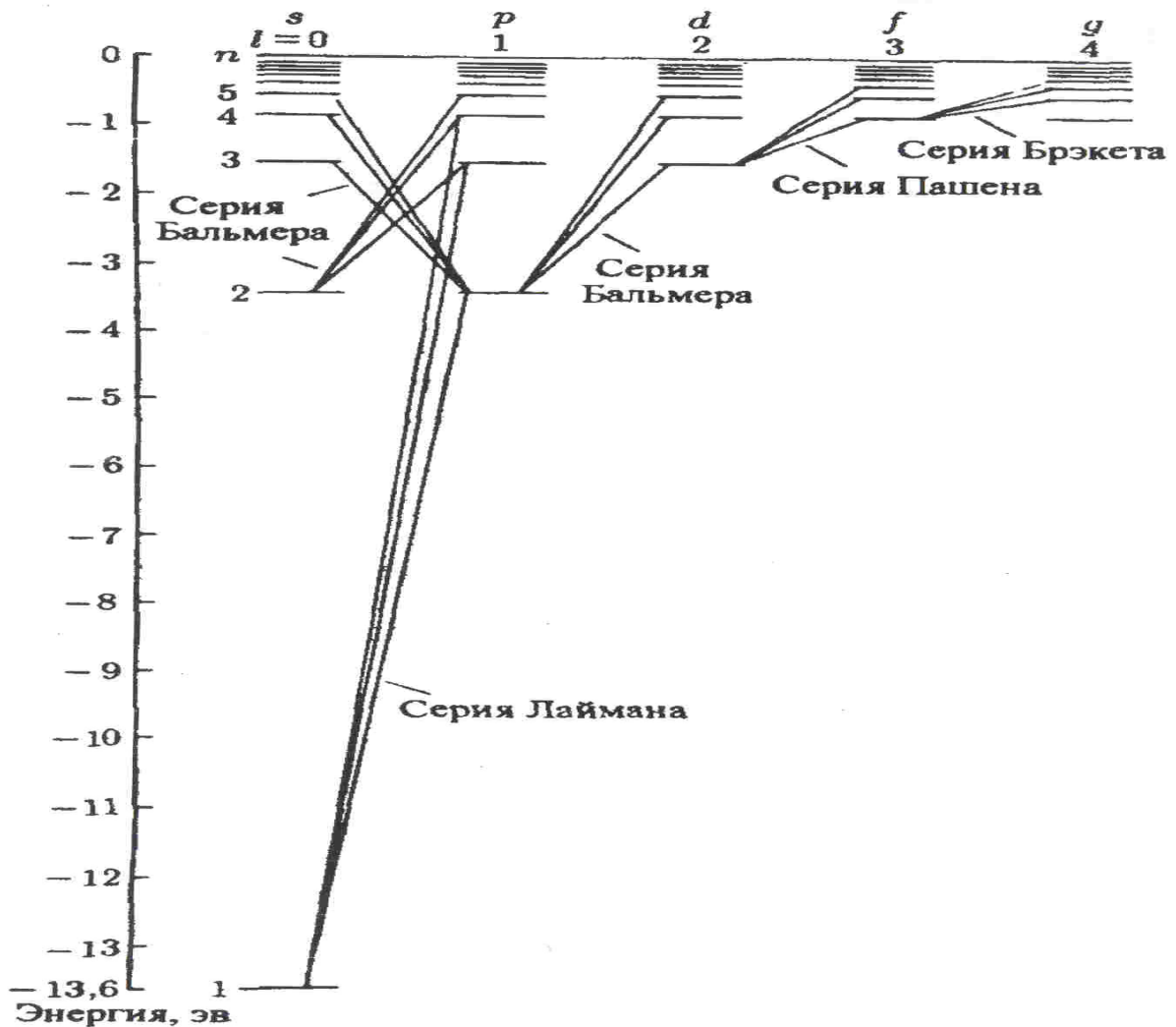


Рис.

Естественная ширина спектральных линий.

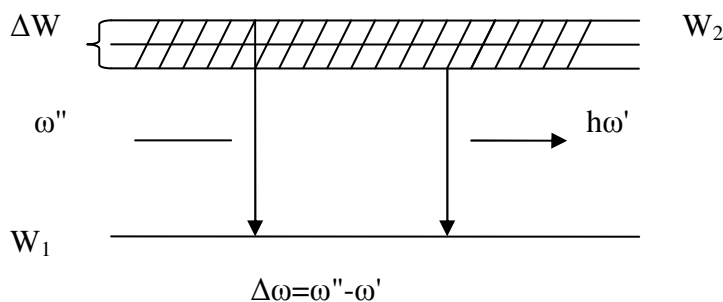
Время τ , за которое число атомов в возбужденном состоянии $W_n (n = 2, 3, \dots)$ уменьшается в e раз, называется временем жизни возбужденного состояния. Время жизни атома в возбужденном состоянии $\tau \sim 10^{-8} - 10^{-9} \text{ с}$. Из соотношения неопределенностей следует, что:

$$\Delta W \cdot \tau \geq \hbar; \quad \Delta W \geq \frac{\hbar}{\tau}, \quad \text{следовательно, при переходе}$$

электрона частота спектральной линии неопределенна

$$\Delta \omega = \frac{\Delta W}{\hbar} = \frac{1}{\tau} \sim 10^8 \text{ Гц}$$

$\Delta \lambda \sim 10^{-4} \text{ \AA}$ - это естественная ширина спектральной линии.



Тепловое движение излучающих атомов приводит к доплеровскому расширению спектральных линий.

$$\Delta \omega \sim 5 \cdot 10^9 \text{ Гц}; \quad \Delta \lambda \sim 3 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}.$$

Каждая линия спектра атомов щелочных металлов является двойной (дуплет). Структура спектра, отражающая расщепление линий на компоненты, называется тонкой структурой. Сложные линии, состоящие из нескольких компонент, получили название мультиплеты. Тонкая структура спектров обусловлена спин-орбитальным взаимодействием.

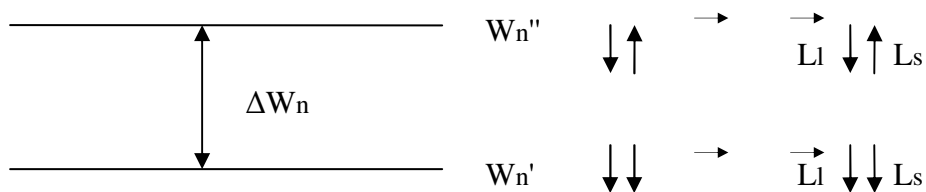


Рис.

Следовательно имеем два разных значения энергии и линия расщепляется на дуплет.

$$\Delta W_n = \frac{\alpha^2}{16} W_n, \quad \text{где} \quad \alpha^2 = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \quad - \quad \text{постоянная тонкой}$$

структуры.

Эффект Зеемана – расщепление энергетических уровней атома под действием магнитного поля.

$$\Delta W = \mu_B \cdot B = \frac{e \hbar}{2 m_e} B \quad - \quad \text{нормальный эффект Зеемана.}$$

В отсутствие магнитного поля наблюдается одна линия с частотой ω_0 . При включении поля, кроме линии ω_0 появляются две расположенные симметрично относительно нее линии с частотами.

$$\omega_0 + \Delta\omega_0 \quad \text{и} \quad \omega_0 - \Delta\omega_0$$

$$\Delta\omega_0 = \frac{\Delta W}{\hbar} = \frac{e}{2 m_e c} B$$

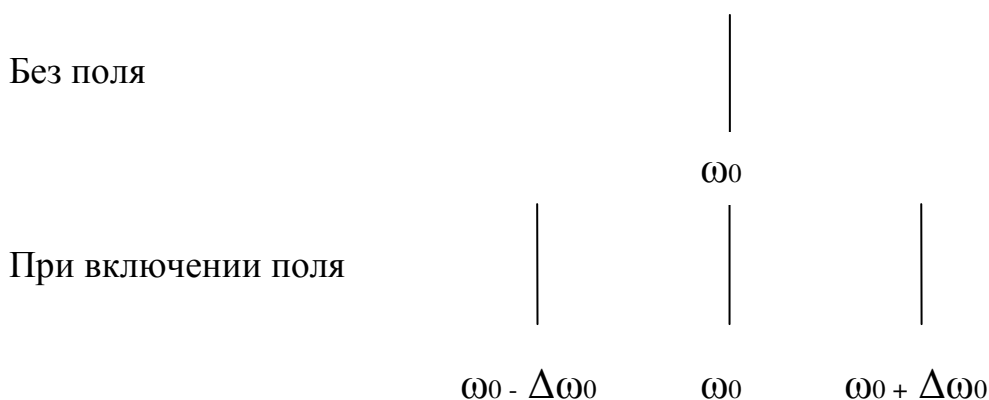


Рис.

Электронный парамагнитный резонанс – резонансное поглощение электромагнитных волн с частотой $\omega = \Delta \omega = \frac{\mu_B}{\hbar} B$, соответствующей зеемановскому расщеплению.

Спектры атомов щелочных металлов.

Спектры излучения атомов щелочных металлов, подобно спектру атома водорода, состоят из нескольких серий линий. Наиболее интенсивные из них: главная, резкая, диффузная и основная (Бергмана). Линии спектра атома Na можно представить как переходы между энергетическими уровнями, изображенными на рис.

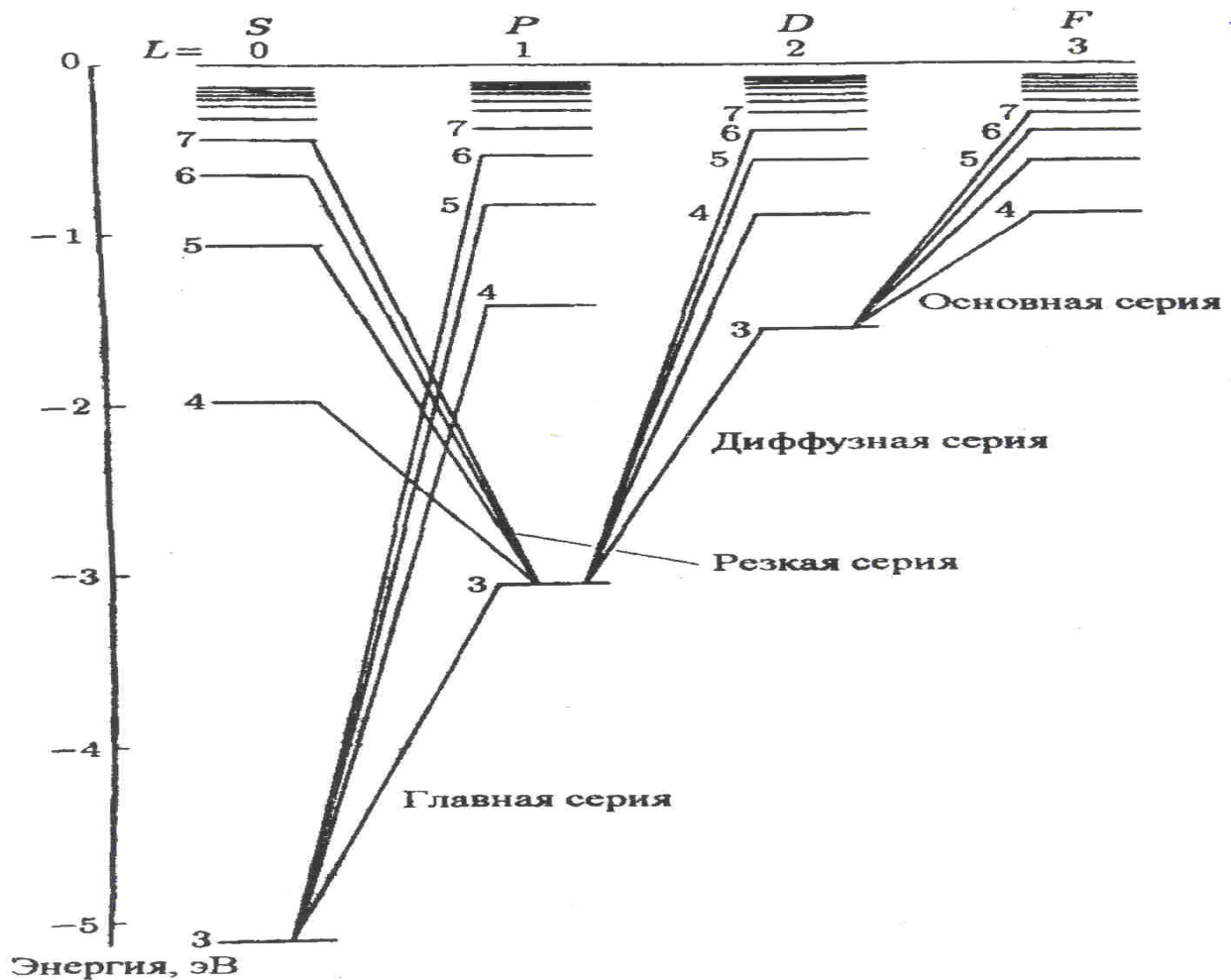


Рис.

Серии образованы переходами валентного электрона и напоминают серии атома водорода и водородоподобных ионов. Отличие состоит в том, что энергетические уровни зависят не только от главного квантового числа n , но и от ℓ , т.е. $E = E_{nl}$.

Спектральные серии натрия могут быть представлены в следующем виде:

a) Резкая серия $\omega = 3P - nS \quad (n = 4, 5, \dots)$

b) Главная серия $\omega = 3S - nP \quad (n = 3, 4, \dots)$

c) Диффузная серия $\omega = 3P - nD \quad (n = 3, 4, \dots)$

d) Основная серия $\omega = 3D - nF \quad (n = 4, 5, \dots)$

Термы щелочных металлов записываются в виде

$$T(n, \alpha) = \frac{R}{(n + \alpha)^2}$$

где $\alpha = s, p, d, f$ – ридберговские поправки, или квантовые дефекты.

Для Na: $s = -1,35$; $p = -0,87$; $d = -0,01$; $f = 0,00$.

Следовательно:

a) Резкая серия $\omega = \frac{R}{(3 + p)^2} - \frac{R}{(n + s)^2} \quad (n = 4, 5, \dots)$

b) Главная серия $\omega = \frac{R}{(3 + s)^2} - \frac{R}{(n + p)^2} \quad (n = 3, 4, \dots)$

c) Диффузная серия $\omega = \frac{R}{(3 + p)^2} - \frac{R}{(n + d)^2} \quad (n = 3, 4, \dots)$

d) Основная серия $\omega = \frac{R}{(3 + d)^2} - \frac{R}{(n + f)^2} \quad (n = 4, 5, \dots)$

Рентгеновские спектры металлов.

Изолированные атомы дают спектр излучения в виде отдельных линий, а молекулы дают спектры в виде отдельных полос. Многоэлектронные атомы металлов дают рентгеновское излучение, возникающее при переходах электронов между внутренними уровнями в атомах. Рентгеновское излучение имеет длину волны порядка $\lambda \sim 10^{-7} \div 10^{-14}$ м

Рентгеновские лучи возникают при торможении быстрых электронов на металлическом антикатоде в рентгеновской трубке (Рис.).

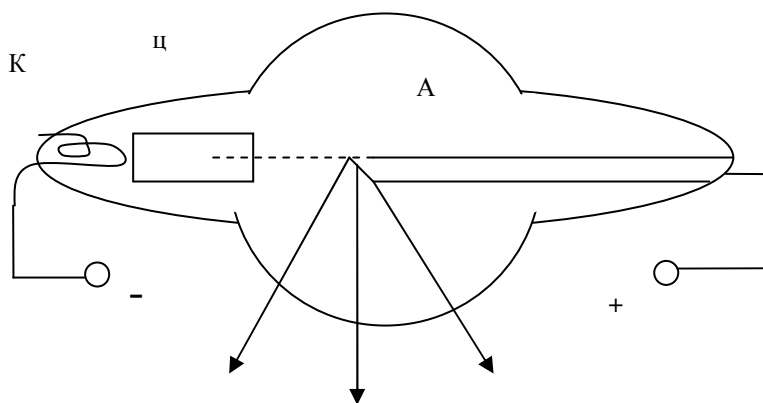


Рис.

Нагреваемый катод служит источником свободных электронов. Цилиндрический катод служит для фокусировки электронного пучка. Антикатоде делают из тяжелых металлов. Электроны, вылетающие из катода, разгоняются электрическим полем и тормозятся на антикатоде. При торможении электронов возникает рентгеновское излучение. Рентгеновское излучение бывает двух видов:

1. Тормозное или «белое» излучение.

Оно имеет сплошной спектр и не зависит от материала антикатода.

Когда энергия бомбардирующих электронов становится достаточной для вырывания электронов с внутренних оболочек (т.е. при высоких энергиях бомбардирующих электронов) на фоне тормозного сплошного излучения возникает характеристическое излучение (характеризует вещество антикатода).

Характеристические спектры имеют линейчатую структуру, характерную для данного элемента и независимую от химического соединения, в котором элемент находится. В характеристических спектрах наблюдаются серии, похожие на оптические, но с другими параметрами (Рис.).

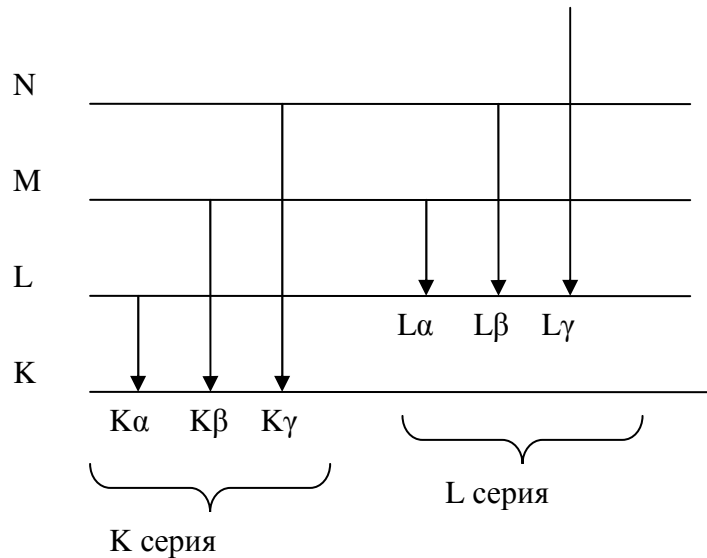


Рис.

K, L, M, N,... - внутренние оболочки

Частоты линий серии $\nu_\alpha < \nu_\beta < \nu_\gamma$ и их интервалы $J_\alpha > J_\beta > J_\gamma$

$$I_\alpha > I_\beta > I_\gamma$$

Мозли установил закон для частот характеристических рентгеновских спектров.

$$\nu = R(z - a)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

ν - частота характеристического излучения

R – постоянная Ридберга $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$

m и n – квантовые числа, соответствующие уровням перехода

a – постоянная экранирования (учитывает влияние внутренних электронных оболочек, экранирующих электрическое поле ядра).

$$a_K = 1; \quad a_L = 7,5.$$

Строение и оптические свойства молекул.

1. Виды химической связи атомов.

Молекула – наименьшая частица вещества, обладающая его основными химическими свойствами. Она состоит из одинаковых или различных атомов, соединенных химическими связями.

Связи: ионная (гетерополярная) и ковалентная (гомеополярная).

Ионная связь: молекула состоит из двух ионов противоположных знаков. Внешние электроны распределяются таким образом, что у одного из ядер образуется их избыток, а у другого – недостаток. Такие молекулы называются ионными или гетерополярными (NaCl; HCl и т.д.)

Ковалентная связь: - образуется парами электронов с противоположно направленными спинами. В молекулах с ковалентной связью часть электронов движется около обеих ядер. Такие молекулы называют атомными или гомеополярными (H₂, N₂, O₂ и т.д.).

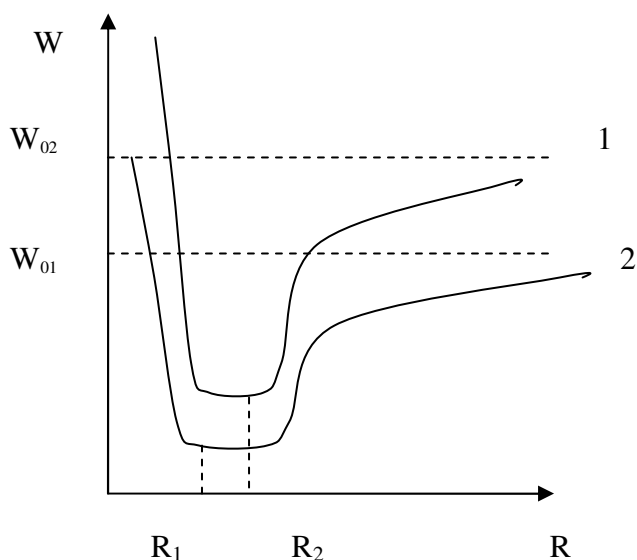


Рис.

Проведенные Гайтлером и Лондоном расчеты (1927 г.) основных состояний молекул H_2 дали следующие результаты: собственные значения энергии 1) квантованные и 2) зависят от расстояния между ядрами.

На рис. 1 и 2 – энергия при различной электронной конфигурации атомов (энергия электронов)

R_1 и R_2 – оптимальное расстояние между ядрами с \min энергией.

W_{01} и W_{02} - асимптотическое значение энергии при $R \rightarrow \infty$ равно сумме энергий изолированных атомов.

Энергетические уровни молекул.

Энергия молекулы складывается из:

1. W_e - энергии электронов (обусловлена электронной конфигурацией) – изменяется дискретно.
2. W_v - колебательная энергия (обусловлена колебаниями молекулы) – изменяется дискретно.
3. W_r - вращательная энергия (обусловлена вращением молекулы относительно центра масс) – изменяется дискретно.

Таким образом энергия молекулы

$$W = W_e + W_v + W_r$$

Колеблющуюся молекулу можно считать гармоническим осциллятором, энергия которого квантована

$$W_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0,$$

Где $v = 0, 1, 2, \dots$ - колебательное квантовое число; ω_0 - собственная классическая частота осциллятора.

Правило отбора: $\Delta v = \pm 1$.

Вращательная энергия

$$W_r = \frac{J\omega^2}{2} = \frac{(J\omega)^2}{2J} = \frac{M^2}{2J},$$

где $M = J\omega$ - момент импульса молекулы, квантуется как

$$M = \hbar \sqrt{g(g+1)}$$

$g = 0, 1, 2, \dots$ - вращательное квантовое число.

Правило отбора: $\Delta g = \pm 1$

Таким образом вращательная энергия молекулы квантована:

$$W_r = \frac{\hbar^2 g(g+1)}{2J}$$

Следовательно, полная энергия молекулы:

$$W = W_e + \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 g(g+1)}{2J}$$

Из теории и опыта известно, что:

$$W_e : W_v : W_r = 1 : \sqrt{\frac{m_e}{M_{\text{я}}}} : \frac{m_e}{M_{\text{я}}}$$

где m_e - масса электрона, $M_{\text{я}}$ - масса ядра.

Причем $\frac{m_e}{M_{\text{я}}} \sim 10^{-5} \div 10^{-7}$, следовательно

$$W_e \gg W_v \gg W_r$$

Разность соседних уровней энергии:

$$\Delta W_e \gg \Delta W_v \gg \Delta W_r$$

Схема энергетических уровней молекулы имеет вид:

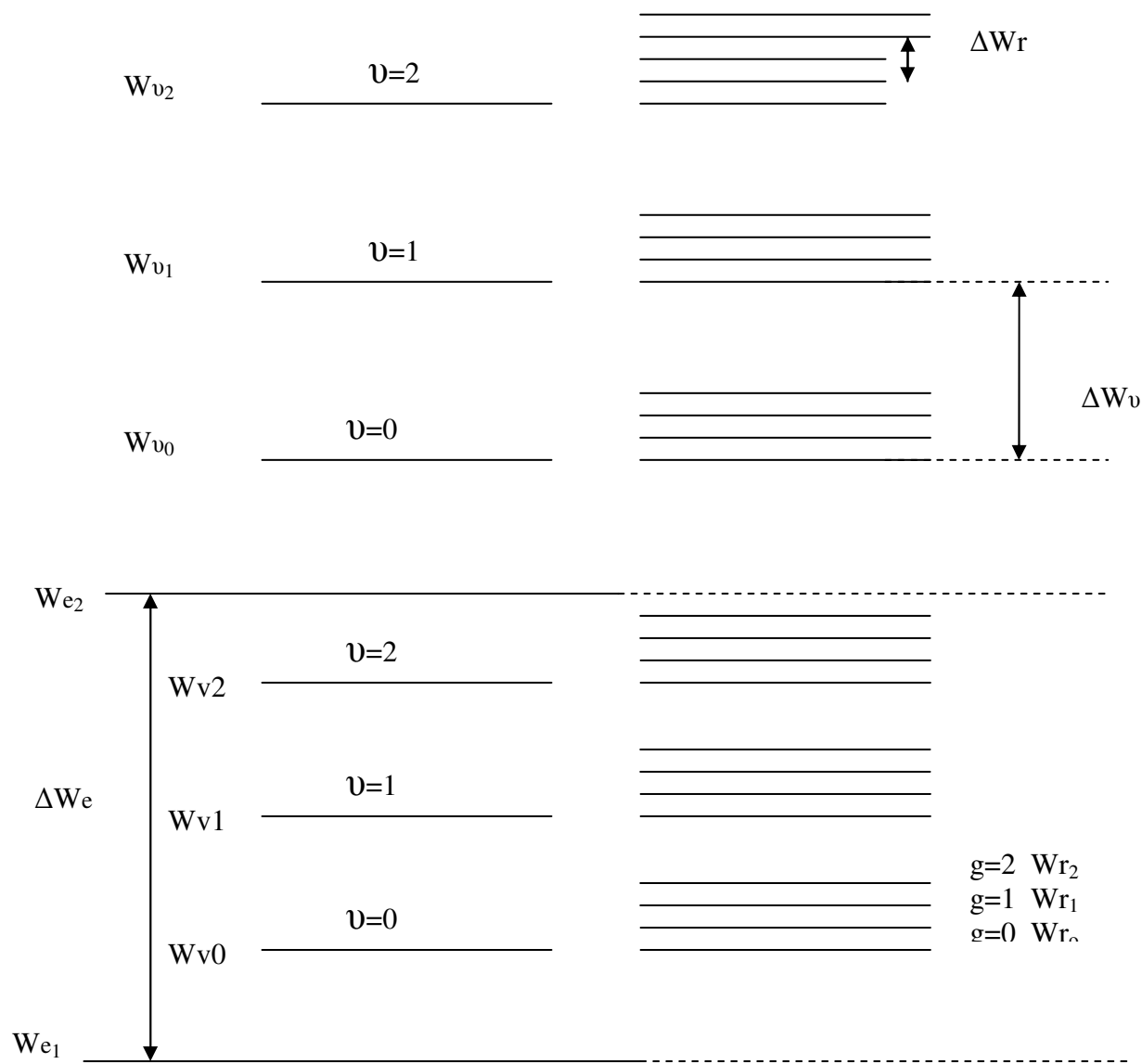


Рис.

Спектры излучения молекул.

Молекулярные спектры возникают при квантовых переходах между уровнями энергии молекул. Типичный спектр излучения молекул представляет собой полосы. Полосы образуются близко расположенными друг к другу линиями (Рис.).



Рис.

Различают три вида полос:

1. вращательные – при изменении только вращательной энергии W_r .
2. колебательно-вращательные – при изменении колебательной W_v и вращательной W_r энергий.
3. электронно-колебательные – при изменении электронной W_e и колебательной W_v энергий.

Вращательные полосы находятся в далекой инфракрасной области, поскольку энергия фотонов

$$\hbar \omega = \Delta W_r = \frac{\hbar^2}{2J} [g_1(g_1 + 1) - g_2(g_2 + 1)]$$

мала.

Учитывая правило отбора $\Delta g = \pm 1$, имеем

$$g_1 = g_2 + 1; \quad \omega = \frac{\Delta W_r}{\hbar} = \frac{\hbar}{J} (g + 1) = \omega_1 (g + 1) .$$

Схему уровней и спектр излучения молекулы схематически можно изобразить следующим образом (Рис.):

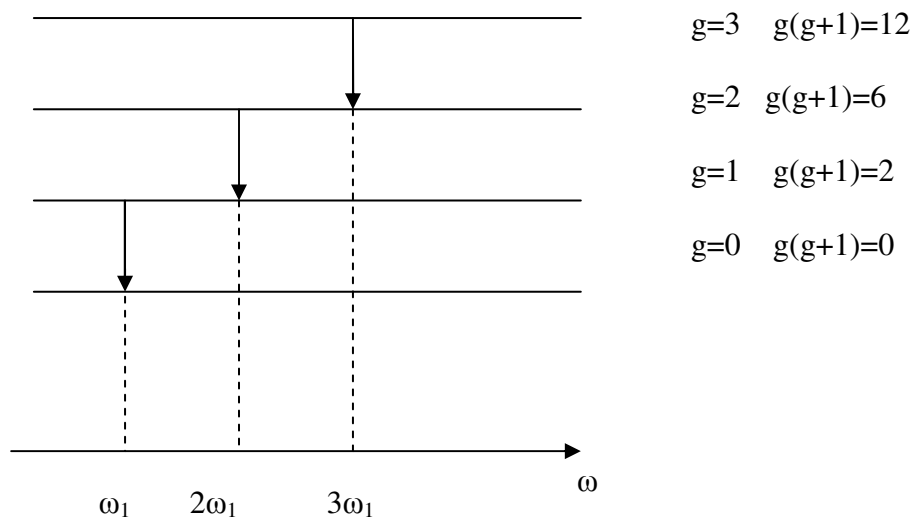


Рис.

Зная расстояние между линиями в спектре $\Delta \omega = \omega_1$ можно определить:

- момент инерции молекулы $J = \frac{\hbar}{\omega_1}$

- равновесное расстояние между ядрами молекулы $r = \sqrt{\frac{J}{\mu}}$, где μ – приведенная масса.

Колебательно-вращательные полосы находятся в инфракрасной области ($8 \cdot 10^3 - 5 \cdot 10^4 \text{ } \overset{\circ}{\text{A}}$). Если при квантовом переходе изменяются колебательное и вращательное состояния, то излучается фотон

$$\hbar \omega = \Delta W_v + \Delta W_r = \hbar \omega_v \left(v_1 + \frac{1}{2} \right) - \hbar \omega_v \left(v_2 + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2J} [g_1(g_1 + 1) - g_2(g_2 + 1)]$$

частоты которого: $\omega = \omega_v \pm \omega_1 \cdot k$, где $k = 1, 2, 3, \dots$

Схему уровней и спектр излучения можно представить в виде (Рис.):

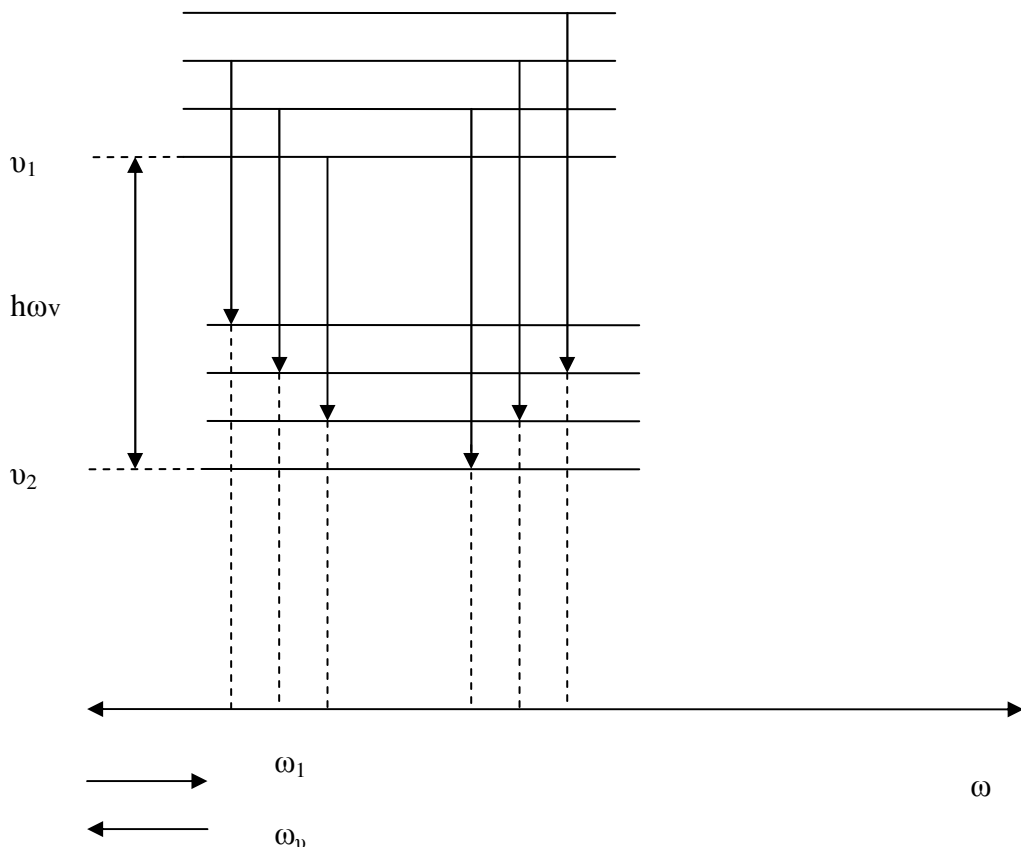


Рис.

ω_v – определяет спектральную область расположения полосы излучения,

$\pm \omega_1 k$ - определяет структуру полосы излучения

ω_v - линия излучения не возникает, т.к. $\Delta g = \pm 1$

Вращательные и колебательно-вращательные спектры наблюдаются только у несимметричных молекул (молекулы, состоящие из различных атомов), поскольку их дипольный момент не равен нулю. Электронно-колебательные спектры наблюдаются у всех молекул.

Элементы квантовой электроники.

Поглощение, спонтанное и вынужденное излучение.

Согласно первому постулату Бора, электрон находится в одном из стационарных состояний в атоме, описываемым главным квантовым числом n .

Его энергия при этом W_n , волновая функция

$$\psi_n(r, t) = \psi_n(r) \cdot e^{-\frac{iW_n t}{\hbar}}$$

Вероятность нахождения в этом состоянии $|\psi_n|^2 = const$,

Следовательно, электрон в этом состоянии может находиться сколь угодно долго. Атом, находящийся в возбужденном состоянии с $n > 1$, самопроизвольно переходит в основное, с $n = 1$ и при этом излучает фотон (Рис.).

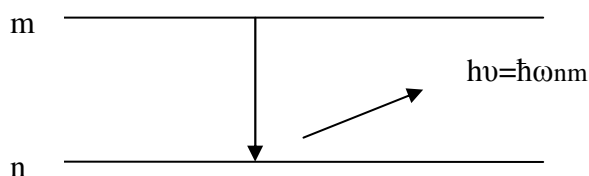


Рис.

Спонтанное излучение – это излучение, происходящее в отсутствии внешней причины. Энергия излучаемого фотона

$$\hbar \omega_{nm} = W_n - W_m .$$

$P_{nm}^{sp} = A_{nm}$ - коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения, представляет собой вероятность перехода атома из состояния n в состояние m за время $1c$.

Вынужденное излучение – возникает при переходах на нижний энергетический уровень под действием вынуждающего излучения соответствующей частоты ω и сопровождается поглощением.

Эйнштейн установил, что спонтанных и вынужденных переходов недостаточно для объяснения существующих состояний равновесия между излучением и веществом. Для возможности установления равновесия при произвольной интенсивности падающего излучения необходимо существование «испускательных» переходов, вызываемых излучением. Вероятность вынужденного излучения (вынужденного перехода) пропорциональна плотности энергии вынуждающего излучения

$$P_{nm} = B_{nm} W_{\omega}$$

Вероятность поглощения

$$P_{mn} = B_{mn} W_{\omega}$$

Эйнштейн доказал, что вероятность вынужденных переходов, сопровождающихся излучением должна быть равна вероятности вынужденных переходов, сопровождающихся поглощением света. Следовательно, вынужденные переходы могут с равной вероятностью происходить как в одном, так и в другом направлении, т.е.

$$P_{nm} = P_{mn} \text{ и следовательно } B_{nm} = B_{mn} .$$

Число переходов между уровнями n и m в равновесии равны, т.е.

$$N_{nm} = N_{mn}$$

Или

$$N_{nm}^{sp} + N_{nm}^{вын} = N_{mn}^{вын}$$

Используя

$$N_{nm}^{sp} = A_{nm} N_n , N_{nm}^{вын} = B_{nm} N_n W_{\omega} , N_{mn}^{вын} = B_{mn} N_m W_{\omega}$$

и получим

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

Отсюда

$$W_{\omega} = \frac{N_n A_{nm}}{B_{nm} (N_m - N_n)} = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{1}{\frac{N_m}{N_n} - 1}$$

В равновесии распределение атомов по состояниям с различной энергией подчиняется распределению Больцмана

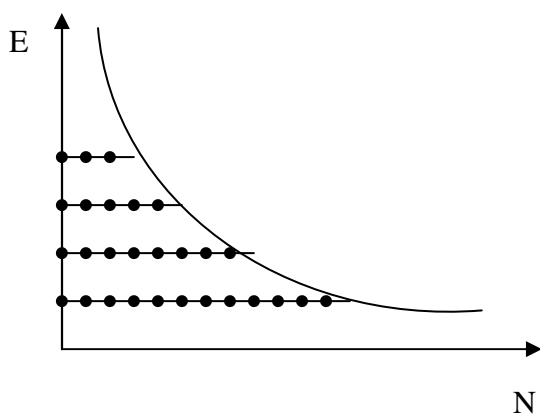
$$\frac{N_m}{N_n} = e^{(W_n - W_m) / kT} = e^{\frac{\hbar \omega}{kT}}$$

Следовательно

$$W_{\omega} = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}$$

Причем:
$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3}$$

В состоянии равновесия число атомов, находящихся в основном состоянии намного превосходит число атомов, находящихся в возбужденном состоянии, поэтому поглощение падающей световой волны будет преобладать над вынужденным излучением и падающая волна при прохождении через вещество ослабляется. Изменение интенсивности света при прохождении через поглощающую среду описывается законом Бугера-Ламберта $J = J_0 e^{-\alpha l}$



На рис. приведено равновесное распределение атомов, при нем преобладает поглощение. Коэффициент поглощения $\alpha > 0$. Переход из возбужденного состояния в основное спонтанно сопровождается

испусканием фотона с энергией $h \nu_{12} = E_2 - E_1$ (Рис.).

Рис.

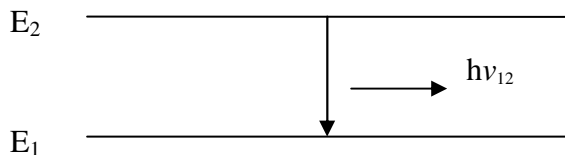


Рис.

Спонтанное излучение некогерентно, т.к. спонтанные переходы в атомах независимы.

Если на атом, находящийся в возбужденном состоянии падает излучение с частотой hν₁₂, то возникает вынужденный переход в основное состояние с излучением фотона $h \nu_{12} = E_2 - E_1$. Это излучение называется вынужденным (Рис.).

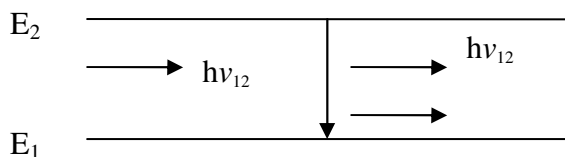


Рис.

Для того чтобы создать усиление падающей волны, необходимо создать инверсную заселенность уровней (Рис.). В веществе с инверсной заселенностью вынужденное излучение превышает поглощение света

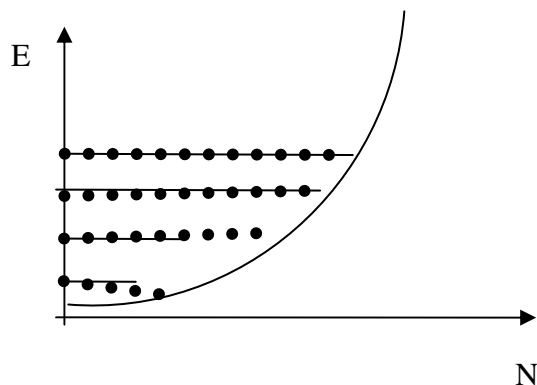


Рис.

атомами, в следствие чего падающий пучок света при прохождении среды будет усиливаться. Такие среды называются оптически активными. Если формально применить распределение Больцмана к инверсной заселенности, то получим для T отрицательное заключение. Следовательно,

состояние с инверсной заселенностью называют состояние с отрицательной

температурой. Процесс создания инверсной заселенности уровней называется оптической накачкой.

Изменение интенсивности света при прохождении света через оптически активную среду описывается формулой.

$$J = J_0 e^{|\alpha|l}$$

В веществе с инверсной заселенностью энергетических уровней вынужденное излучение может превысить поглощение, вследствие чего падающий пучок света будет усиливаться. В случае усиления падающего пучка явление протекает так, будто α отрицательно. Следовательно, совокупность атомов с инверсной населенностью можно рассматривать как среду с отрицательным коэффициентом поглощения.

Экспериментально индуцированное излучение было обнаружено в 1939г Фабрикантом. Вынужденное излучение обладает весьма важными свойствами. Направление его распространения в точности совпадает с направлением распространения вынуждающего излучения, т.е. внешнего излучения, вызвавшего переход. То же самое относится к частоте, фазе и поляризации вынужденного и вынуждающего излучений. Следовательно, вынужденное и вынуждающее излучение оказываются строго когерентными. Эта особенность вынужденного излучения лежит в основе действия усилителей и генераторов света (лазеров). В 1953г Басов, Прохоров и Таунс создали новый источник излучения лазер – устройство для генерации и усиления когерентного мощного излучения за счет вынужденного излучения. Лазеры бывают: твердотельные, газовые, полупроводниковые, жидкостные, импульсные и непрерывные.

Рассмотрим устройство и принцип действия рубинового лазера. Рабочим телом лазера является цилиндр из розового рубина. Торцы рубинового стержня строго параллельны и хорошо отполированы. Один торец покрыт непрозрачным слоем серебра, другой торец полупрозрачным слоем серебра.

Рубины - Al_2O_3 с примесями хрома. Вокруг рубинового стержня - лампа накачки. При поглощении света ионы хрома Cr^{3+} переходят в возбужденное

состояние. Процесс перевода ионов хрома в возбужденное состояние называется оптической накачкой. Переход в основное состояние происходит в два этапа. Это безизлучательный переход в метастабильное состояние и затем переход в основное состояние, сопровождающийся излучением (Рис.).

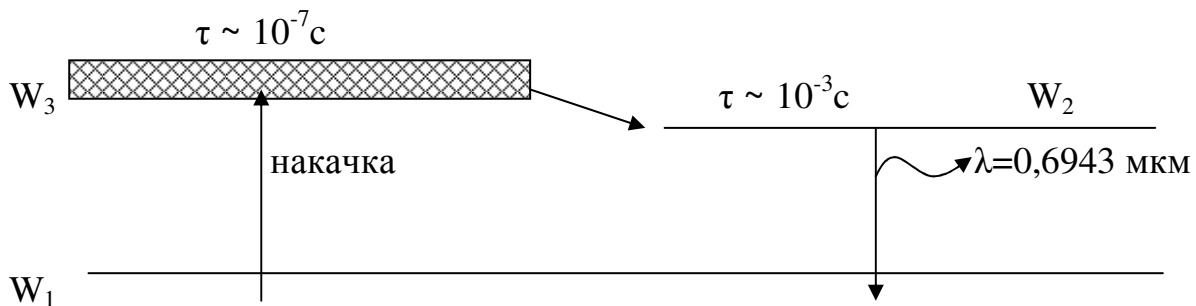


Рис.

Инверсная заселенность создается между уровнями W_1 и W_2 . Это оказывается возможным, так как время жизни электрона на уровне W_2 достаточно велико ($\tau \sim 10^{-3}$ с).

Схематически работу рубинового лазера можно представить следующим образом (Рис.). В начальный момент времени ионы хрома находятся в основном состоянии (Рис. а). При поглощении импульса вспышки большинство ионов хрома переходит в возбужденное состояние (Рис. б). Возбужденные ионы хрома спонтанно излучают фотоны в направлении, параллельном оси кристалла, фотоны, испущенные по другим направлениям, выходят из кристалла (Рис. в). Далее происходит процесс размножения фотонов за счет вынужденного излучения и этот процесс развивается, так как фотоны многократно проходят вдоль оси кристалла, отражаясь от его торцов (Рис. г, д). Многократно усиленный поток фотонов выходит сквозь полупрозрачное зеркало (Рис. е) и создает импульсивный пучок лучей большой интенсивности, остро направленный, с малым расхождением по углам.

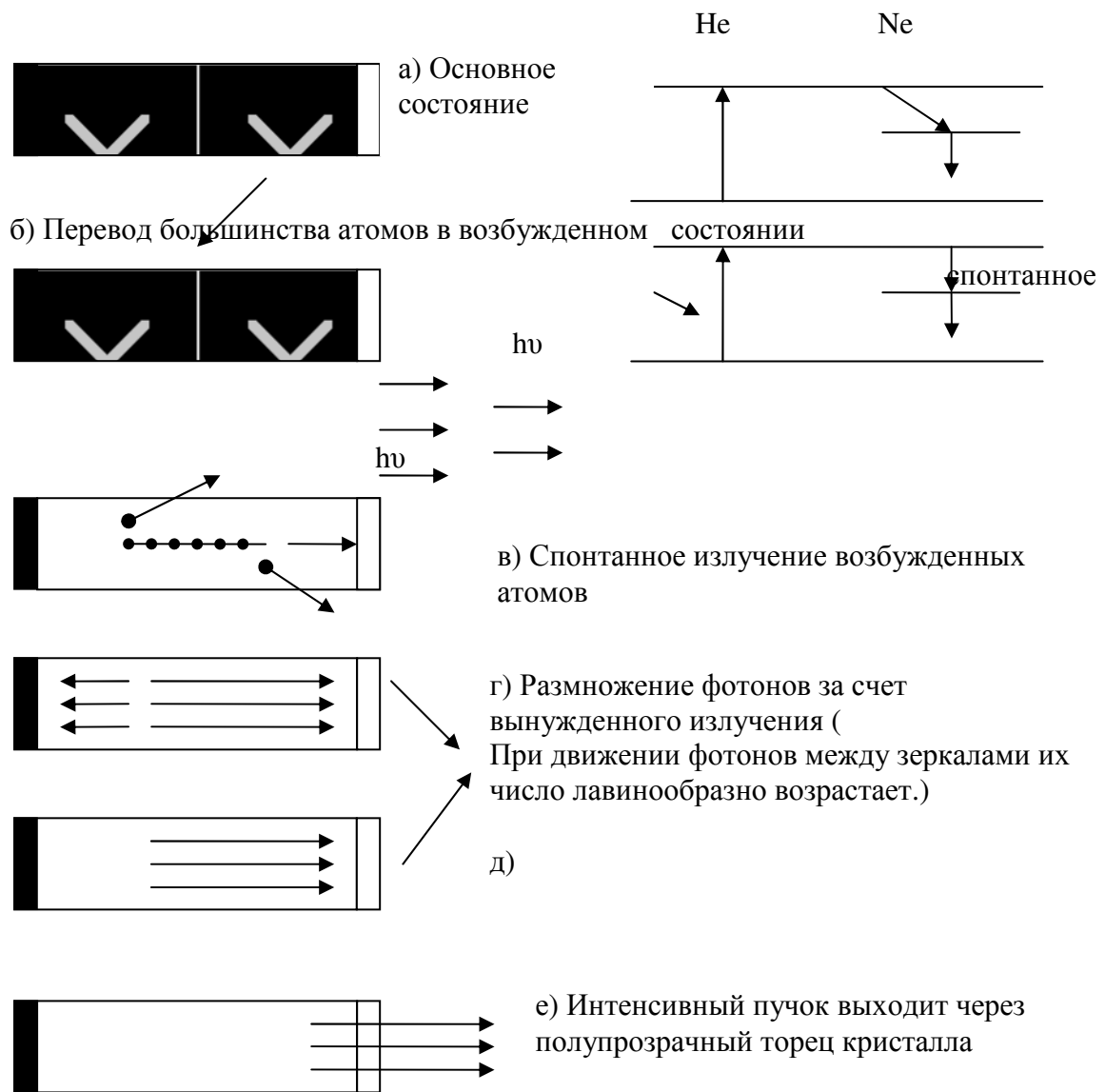


Рис.

Гелий-неоновые лазеры излучают монохроматический, хорошо коллимированный пучок мощностью до нескольких десятков милливатт, работают в импульсивном и непрерывном режимах. Усиливающей средой в гелий-неоновом лазере служит плазма высокочастотного газового разряда, полученная в смеси гелия с неоном. Упрощенная трехуровневая энергетическая диаграмма гелий-неонового лазера изображена на рис.

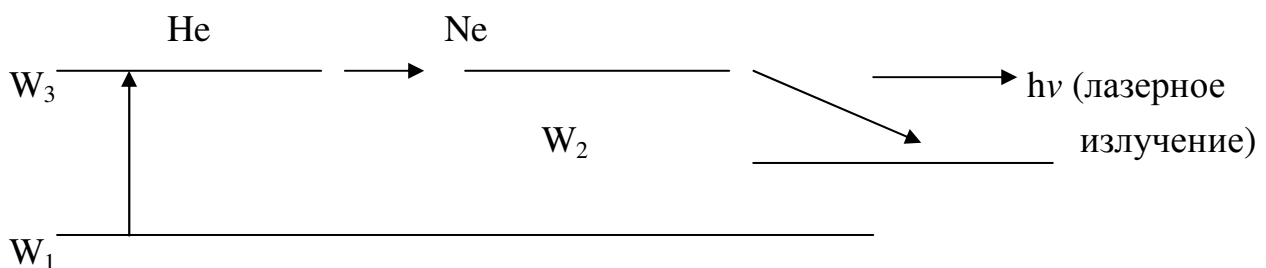


Рис.

Вследствие соударений с электронами атомы гелия переходят из основного состояния W_1 в возбужденное состояние на уровень W_3 . При столкновениях возбужденных атомов гелия с атомами неона эти атомы тоже возбуждаются и переходят на один из верхних уровней неона, близко расположенных к возбужденному уровню W_3 гелия. Таким образом создается инверсная заселенность уровня W_3 . Переход атомов неона с этого возбужденного уровня (W_3) на один из низших уровней W_2 сопровождается излучением лазера.

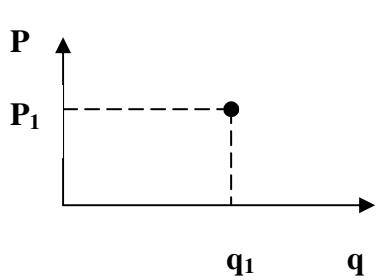
Основные преимущества лазерного излучения.

1. Строгая монохроматичность $\Delta\lambda \sim 0,1\text{Å}$
2. Высокая пространственная $l_{\text{ког}} = 10^5 \text{ м}$ и временная $\tau_{\text{ког}} = 10^{-3} \text{ с}$ когерентность
3. Большая мощность излучения $\sim 2 \cdot 10^{10} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2}$
4. Малое угловое расхождение пучка

Элементы квантовой статистики

Элементарная ячейка. Плотность состояний

Квантовая статистика – статистический метод исследования систем, состоящих из большого числа квантовомеханических частиц. Основная задача квантовой статистики – получить распределение частиц по координатам и скоростям. В классической физике состояние системы задается точкой в фазовом пространстве в координатах \vec{p}, \vec{q} (Рис.).



Здесь $\vec{p} = \{ \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_n \}$ - N-

мерный вектор импульса всех N частиц системы,

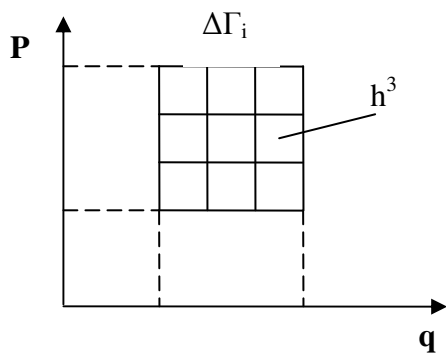
$\vec{q} = \{ \vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_n \}$ - 3N-

Рис. мерный вектор координат N частиц системы. Таким

образом фазовое пространство имеет 6N измерений.

В квантовой физике, учитывая соотношение неопределенностей Гейзенберга $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h$; $\Delta p_y \cdot \Delta y \geq h$; $\Delta p_z \cdot \Delta z \geq h$, состояние системы задается ячейкой, объем которой $\Delta p_x \cdot \Delta x \cdot \Delta p_y \cdot \Delta y \cdot \Delta p_z \cdot \Delta z = h^3$. Задача квантовой статистики: определить число частиц в ячейке – в одном квантовом состоянии с определенным набором квантовых чисел.

Пусть элементарный объем $\Delta \Gamma_i$ соответствует энергии системы в интервале от W_i до $W_i + \Delta W_i$ и этот объем содержит n_i частиц.



В объеме $\Delta \Gamma_i$ содержится $\Delta g_i = \frac{\Delta \Gamma_i}{h^3}$

ячеек – число квантовых состояний соответствующих энергии в указанном интервале.

Функция распределения

$$\rho = \frac{n_i}{\Delta g_i} -$$

среднее число частиц в одном состоянии – средняя заселенность состояний с данной энергией W_i – плотность состояний.

Статистика Ферми-Дирака

Фермионы – это частицы с полуцелым спином: $m_s = \pm(2n+1)\frac{\hbar}{2}$, где $n=0; 1;$

2;.... Волновая функция фермионов ассиметрична $\psi(\mathbf{x}_1; \mathbf{x}_2)=-\psi(\mathbf{x}_2; \mathbf{x}_1)$. Фермионы – электроны, протоны, нейтроны, подчиняются принципу Паули: в данном квантовом состоянии не может находиться более одного фермиона.

Системы фермионов описываются статистикой Ферми-Дирака

$$S_{\phi} = \frac{1}{\exp\left(\frac{w_i - \mu}{kt}\right) + 1}$$

где $\mu = \frac{U - TS + pV}{N}$ - химический потенциал. Химический потенциал равен изменению внутренней энергии в изобарно-изотермическом процессе при увеличении числа частиц в системе на единицу.

$$\mu = \left(\frac{dU}{dN}\right)_{p,T}$$

Статистика Бозе-Эйнштейна

Колебания атомов в кристаллической решетке не являются независимыми. Смещение одного атома из положения равновесия влечет за собой смещения других соседних с ним атомов. Следовательно, кристалл представляет собой систему N упруго связанных друг с другом атомов, обладающих $3N$ степенями свободы. В твердом теле для описания колебаний атомов в кристаллических решетках вводятся квазичастицы упругих (или звуковых) колебаний решетки. Они подобны фотонам и соответствующим электромагнитным колебаниям. Кванты упругих волн называются фононами. Кванты электромагнитных волн есть фотоны. Энергия фотона $\epsilon_{\text{фот}} = h\nu$.

Фонон во многих отношениях ведет себя так, как если бы он был частицей с энергией $\epsilon = h\nu_{\text{фон}}$, где $\nu_{\text{фон}} = \nu_{\text{звука}}$, и импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Однако, в отличие от обычных частиц (электронов, протонов, фотонов и т. д.) фонон не может возникнуть в вакууме. Для своего возникновения и существования фонон

нуждается в некоторой среде. Подобного рода частицы называются квазичастицами. Спин фонона как и у фотона равен 0 ($S=0$), масса покоя $m_0=0$. Фотоны и фононы не подчиняются принципу Паули и в любом состоянии их может быть любое количество. Они могут испускаться и поглощаться без сохранения общего числа.

Колебания кристаллической решетки можно представить как фононный газ, заключенный в пределах образца кристалла, подобно тому, как электромагнитное излучение можно представить как фотонный газ, заполняющий полость. Формально, оба представления очень схожи – и фотоны, и фононы подчиняются одной и той же статистике. Но есть и существенное различие: фотоны являются частицами; фононы есть квазичастицы.

Частицы с целым спином $m_s = \pm 2n \frac{\hbar}{2}$, $n=0; 1; 2; \dots$ называются бозонами. Их волновая функция симметрична: $\psi(\mathbf{x}_1; \mathbf{x}_2) = \psi(\mathbf{x}_2; \mathbf{x}_1)$. Системы бозонов описываются статистикой Бозе-Эйнштейна.

$$S = \frac{1}{\exp\left(\frac{w_i - \mu}{kt}\right) - 1}$$

Вырожденные системы квантовых частиц

Ферми – или бозе-газ (системы фермионов или бозонов) называется вырожденным, если его свойства отличаются от свойств классического идеального газа. Вырождение возникает за счет квантово-механического взаимодействия частиц. Степень вырождения характеризует параметр вырождения

$$A = e^{\frac{\mu}{kt}}$$

С учетом параметра вырождения квантовые статистики принимают вид

$$\rho = \left[\frac{\exp\left(\frac{w_i}{kt}\right)}{A} \pm 1 \right]^{-1}, \quad (1)$$

где: (+) - статистика Ферми-Дирака

(-) - статистика Бозе-Энштейна

При $A \ll 1$, $\exp\left(\frac{w_i}{kt}\right) \gg 1$ и из (1) получается функция распределения

Максвелла-Больцмана

$$S_M = A e^{-\frac{w_i}{kt}}$$

Параметр вырождения определяется из условия нормировки: $\sum_{i=1}^N n_i = n$.

Это условие означает сохранение в системе общего числа частиц:

$$A = \frac{n_0 h^3}{(2\pi m k T)^{3/2}}$$

Условие вырождения $A=1$. Отсюда температура вырождения

$$T_B = \frac{h^2 n_0^{2/3}}{2\pi m k}, \quad (1)$$

где n_0 – концентрация частиц, m – масса частиц.

Температурный критерий вырождения: $T \ll T_B$ – система частиц вырождена, $T \gg T_B$ – система частиц не вырождена (т. е. описывается классическими законами).

Вырожденный электронный Ферми-газ в металлах

Концентрация электронного газа в металлах $n_0 \sim 10^{29} \text{ м}^{-3}$ и $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, по формуле (1) получаем температуру вырождения $T_B \sim 2 \cdot 10^4 \text{ К}$. При таких

температурах металлы не могут находиться в конденсированном состоянии. Следовательно, электронный газ в металлах при обычных температурах является вырожденным, т. е. не подчиняется классической статистике Максвелла-Больцмана.

Функция распределения для электронного газа при $T=0$

$$\rho_{\phi} = \frac{1}{\exp\left(\frac{w - \mu_0}{kt}\right) + 1}$$

Свойства этого распределения:

а) при $w < \mu_0$ и $T \rightarrow 0$ $\exp\left(\frac{\mu_0 - w}{kt}\right) \rightarrow \infty$ и $\rho_{\phi} \rightarrow 1$.

б) при $w \geq \mu_0$ и $T \rightarrow 0$ $\exp\left(\frac{w - \mu_0}{kt}\right) \rightarrow \infty$ и $\rho_{\phi} \rightarrow 0$.

График этого распределения при $T=0$ имеет вид (Рис.):

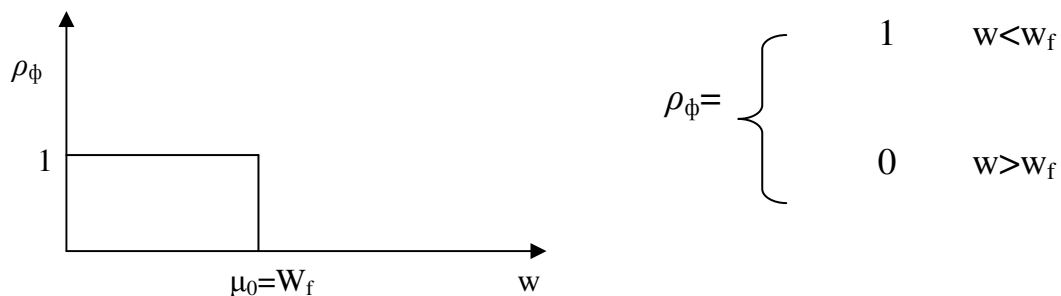


Рис.

Электроны в металле занимают все разрешенные уровни энергии по одному в каждом состоянии вплоть до максимальной энергии $w_F = \mu_0$ – энергия Ферми – это максимальная энергия электронов в металле при $T=0$ К.

Энергия Ферми:

$$W_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n_0}{2\pi} \right)^{2/3},$$

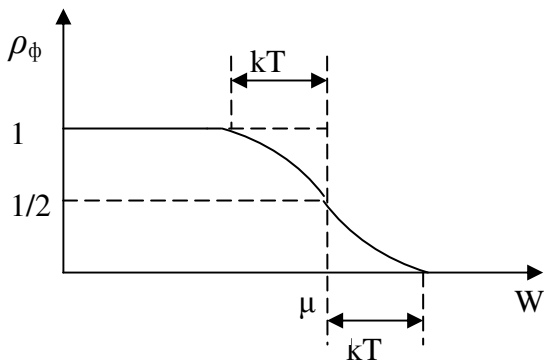
и средняя энергия электронов в металле

$$\langle W \rangle = \frac{3}{5} W_F,$$

При концентрации электронов $n_0 \sim 10^{29} \text{ м}^{-3}$ $W_F \sim 6 \text{ эВ} \sim 10^{-18} \text{ Дж}$. Средняя энергия молекулы невырожденного газа при комнатных температурах

$$\langle W \rangle = \frac{3}{2} kT \sim 4 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} \sim 0,03 \text{ эВ}.$$

Если температура газа отлична от нуля, т. е. $T > 0$, то распределение Ферми-Дирака имеет вид (Рис.):



Искажение затрагивает лишь верхние уровни энергии

$$\mu - kT < W < \mu + kT$$

Химический потенциал электронного газа при температуре T

$$\mu = W_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{W_F} \right)^2 \right]$$

Рис.

Внутренняя энергия одного моля электронного газа:

$$U = \frac{3}{5} N_A W_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{W_F} \right)^2 \right]$$

Зависимость внутренней энергии от температуры для идеального и вырожденного газа представлена на (Рис.).

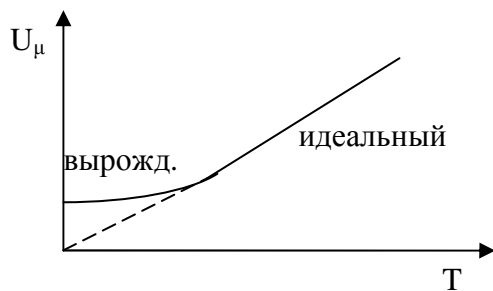


Рис.

Молярная теплоемкость электронного газа

$$C_v = \frac{\partial W}{\partial T} = \frac{\pi^2}{2} N_A k \frac{kT}{W_F} = \frac{\pi^2}{2} R \frac{kT}{W_F}$$

Учитывая, что теплоемкость одноатомного идеального газа $C_{v_{кл}} = \frac{3}{2}R$,

получим
$$\frac{C_v}{C_{v_{кл}}} = \frac{\pi^2 kT}{3 w_F} = \frac{\pi^2 T}{3 T_F}.$$

При комнатных температурах $\frac{C_v}{C_{v_{кл}}} \sim 0,03$, т. е. теплоемкость электронного газа дает ничтожно малый вклад в молярную теплоемкость.

Все состояния при $w < \mu - kT$ заняты, и следовательно, электроны с нижних уровней не могут путем поглощения энергии переходить на верхние уровни.

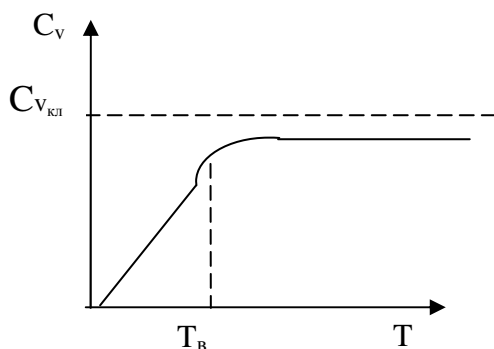


Рис.

Поглощать тепловую энергию могут только электроны, находящиеся вблизи хвоста распределения ρ_f , переходя при этом на свободные, более высокие энергетические уровни. Относительное число этих электронов невелико и, следовательно, теплоемкость электронного газа мала.

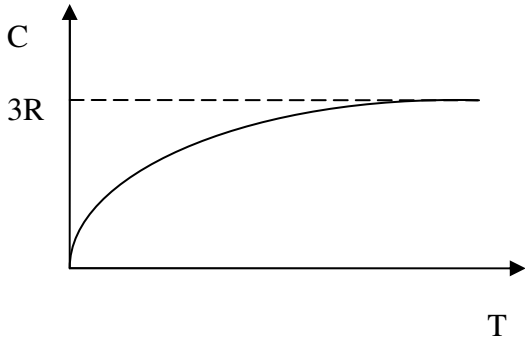
Теплоемкость твердых тел

В твердых телах $C_p = C_v$. Основной вклад в теплоемкость вносят колебания атомов в узлах кристаллической решетки, т. к. теплоемкость электронного газа ничтожно мала. Согласно классической теории предполагается верным закон равномерного распределения энергии по степеням свободы: на одну степень свободы колебательного движения приходится средняя энергия $\langle w \rangle = kT$. Твердое тело рассматривается как система N частиц, имеющая $3N$ степеней свободы. Следовательно, внутренняя энергия одного моля твердого тела

$$U=3N_A\langle w \rangle=3N_AkT=3RT$$

Молярная теплоемкость твердого тела определяется законом Дюлонга-Пти:

$$C=\frac{dU}{dT}=3R$$



Экспериментальная зависимость теплоемкости от температуры имеет вид (Рис.). В области низких температур закон равномерного распределения энергии по степеням свободы не выполняется.

Рис.

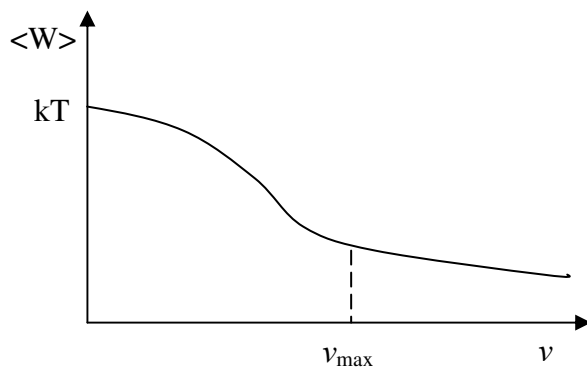
Квантовая теория теплоемкости твердых тел была предложена Эйнштейном и уточнена Дебаем. Колебания атомов в узлах кристаллической решетки имеют широкий спектр частот. Основной вклад в энергию колебаний вносят колебания низких частот (звуковых). Минимальная длина волны, не взаимодействующей решеткой, должна быть порядка периода решетки

$$\lambda_{\min} \sim d \sim \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3},$$

где N – число атомов в объеме V кристалла.

Следовательно:

$$\nu_{\max}=\frac{\nu}{\lambda_{\min}}=\nu\left(\frac{N}{V}\right)^{1/3}=\nu\left(\frac{N}{R^3}\right)^{1/3}=\nu\left(\frac{3N}{4\pi V}\right)^{1/3}$$



Упругие волны в кристалле обладают квантовыми свойствами. Квант энергии звуковой волны с частотой ν есть фонон.

$$W_{\text{фон}} = h\nu$$

Квазиимпульс фонона

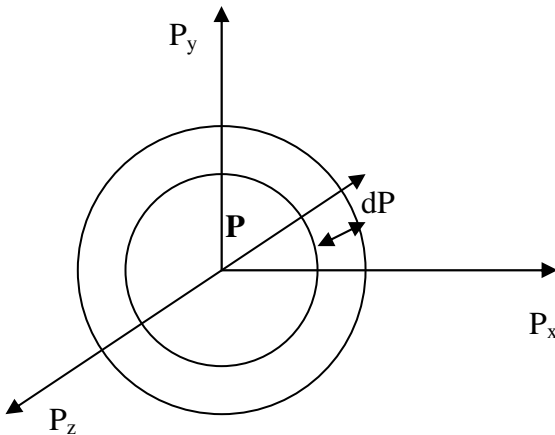
$$p = \frac{h\nu}{v}$$

Фононы подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, химический потенциал фононного газа $\mu = 0$, т. к. их число не сохраняется при взаимодействиях.

Число фононов с частотами в интервале от ν до $\nu + d\nu$ в объеме V кристалла

$$dn = \rho_B dg,$$

где dg – число квантовых состояний в объеме V кристалла.



Элемент фазового объема $d\Gamma = 4\pi p^2 V dp$.

Рис.

Число квантовых состояний в элементе фазового объема $dg = \frac{d\Gamma}{h^3}$; h^3 – объем элементарной ячейки.

$$\text{Тогда: } dg = 3 \frac{\pi \rho^2 d\rho V}{h^3} = \frac{4\pi \nu^2 d\nu}{v^3} V$$

где v – скорость звука в кристалле.

Коэффициент 3 учитывает, что в твердом теле могут распространяться одна продольная и две поперечные волны с взаимно перпендикулярными поляризациями.

Следовательно, число фононов с частотами в интервале от ν до $\nu + d\nu$

$$dn = \frac{12 \pi \nu^2 d\nu}{\nu^3 \left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1 \right]} V$$

Внутренняя энергия кристалла есть сумма энергии фононов всех частот:

$$U = \int_0^{\nu_{\max}} h \nu du = \frac{12 \pi V h}{\nu^3} \int_0^{\nu_{\max}} \frac{\nu^3 d\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}$$

Здесь $\nu_{\max} = \nu \left(\frac{3N}{4\pi V} \right)^{1/3}$ - верхняя граница частот фононов, вносящих вклад в

энергию колебаний. Введем понятие характеристической температуры Дебая

$$\Theta = \frac{h\nu_{\max}}{k} \text{ и обозначим } x = \frac{h\nu}{kT}. \text{ Тогда}$$

$$\left(\frac{\nu_{\max}}{\nu} \right)^3 = \frac{3N}{4\pi V}; \quad \frac{12 \pi V}{\nu^3} = \frac{9N}{\nu_{\max}^3}; \quad \nu = \frac{kT}{h} x$$

$$U = \frac{9hN}{\nu_{\max}^3} \left(\frac{kT}{h} \right)^4 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 9N \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 kT \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

Рассмотрим случаи:

1. Высокие температуры ($T \gg \Theta$) - квантование энергии колебаний несущественно. Для любых

$$x = \frac{h\nu}{kT} \leq \frac{h\nu_{\max}}{kT} = \frac{\Theta}{T} \ll 1$$

$$e^x - 1 \sim x$$

$$\int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \int_0^{\Theta/T} x^2 dx = \frac{1}{3} x^3 = \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta}{T} \right)^3$$

$$U = 9N \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 kT \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta}{T} \right)^3 = 3NkT$$

Для одного моля кристалла

$$U_M = 3N_A kT = 3kT$$

$C_M = 3R$ - закон Дюлонга-Пти.

2. Низкие температуры ($T \ll \Theta$) – квантовые эффекты играют существенную роль.

$$\frac{\Theta}{T} \gg 1.$$

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

$$U = 9N \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 kT \frac{\pi^4}{15} = \frac{3}{5} \pi^4 NkT \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3$$

$$U_M = 9N_A \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 kT \frac{\pi^4}{15} = \frac{3}{5} \pi^3 \frac{R}{\Theta^3} T^4$$

$$C_M = \frac{12}{5} \pi^3 R \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3 - \text{закон Дебая.}$$

Формула Планка для теплового излучения

Тепловое излучение, находящееся в равновесии со стенками полости можно представить как фотонный газ в полости объемом V . Фотонный газ подчиняется статистике Бозе-Эйнштейна

$$\rho_B = \frac{du}{dg} = \frac{1}{\exp\left(\frac{w - \mu}{kT}\right) - 1}$$

Число фотонов в полости не сохраняется, следовательно $\mu=0$; $A = e^{\frac{\mu}{kT}} = 1$ (газ вырожденный, $T_B = \infty$). Чтобы определить функцию Кирхгофа (спектральную плотность энергетической светимости абсолютно черного тела – энергию, излучаемую единицей поверхности в единицу времени в единичном интервале частот) необходимо знать число фотонов с частотами от ν до $\nu + d\nu$

$$dn = S_B dg,$$

где dg – число квантовых состояний в интервале энергий от W до $W + dW$, оно

равно $dg = \frac{d\Gamma}{h^3}$, где $d\Gamma = 4\pi p^2 dp V$ – элемент объема фазового пространства.

Учитывая, что энергия фотона $W=hf$, импульс $p = \frac{hf}{c} = \frac{W}{c}$, получим

$$d\Gamma = 4\pi \frac{W^2}{c^2} \frac{dW}{c} V = \frac{4\pi V}{c^3} W^2 dW = \frac{4\pi V}{c^3} h^3 \nu^2 d\nu.$$

Отсюда $dg = \frac{4\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu$. Тогда $dn = 2 \cdot \frac{4\pi V}{h^3 c^3} \frac{W^2 dW}{e^{\frac{W}{kT}} - 1}$ - число фотонов в

интервале энергий от W до $W+dW$. Коэффициент 2 появляется, если учесть две возможные поляризации волн.

Спектральная плотность объемной плотности энергии

$$\rho(\nu, T) = \frac{W dn}{V d\nu} = \frac{8\pi V}{h^3 c^3 V} \frac{W^3}{e^{\frac{W}{kT}} - 1} \frac{dW}{d\nu} = \frac{8\pi h}{h^3 c^3} \frac{(hf)^3}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1}$$

Функция Кирхгофа

$$r(\nu, T) = \frac{c}{4} \rho(\nu, T) = \frac{2\pi \nu^2}{c^2} \frac{hf}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1} - \text{формула Планка.}$$

Зонная теория твердых тел

Энергетические зоны в кристаллах

Валентные электроны, свободно перемещаясь в металле, обуславливают его проводимость. Поэтому валентные электроны называются электронами проводимости. Пусть в пределах куба со стороной L электроны могут перемещаться свободно.

Уравнение Шредингера для свободного электрона:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = W\psi$$

Его решение

$$\psi = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

где $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar}$ - модуль волнового вектора.

Из условия нормировки:

$$\int \psi \psi^* dV = A \cdot A^* \int dV = |A|^2 L^3 = 1$$

$$A = L^{-3/2}; \quad \psi = \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{L^{3/2}}$$

Граничные условия:

$$\psi(0, y, z) = \psi(L, y, z) = 0.$$

$$\psi(x, 0, z) = \psi(x, L, z) = 0.$$

$$\psi(x, y, 0) = \psi(x, y, L) = 0.$$

Следовательно:

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

Волновая функция принимает вид:

$$\psi = \frac{1}{L^{3/2}} \exp\left[i \frac{2\pi}{L} (n_1 x + n_2 y + n_3 z) \right]$$

Волновой вектор квантован, следовательно квантована и энергия электрона проводимости.

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

Состояние электрона определяется четырьмя квантовыми числами n_1, n_2, n_3, m_s . Все уровни энергии являются вырожденными, и энергия электронов меняется квазинепрерывно, т. е. спектр разрешенных значений энергии состоит из множества близкорасположенных дискретных уровней. В действительности валентные электроны в кристалле движутся не свободно, а в периодическом поле решетки. Поэтому спектр возможных значений энергии валентных электронов распадается на ряд чередующихся разрешенных и запрещенных зон.

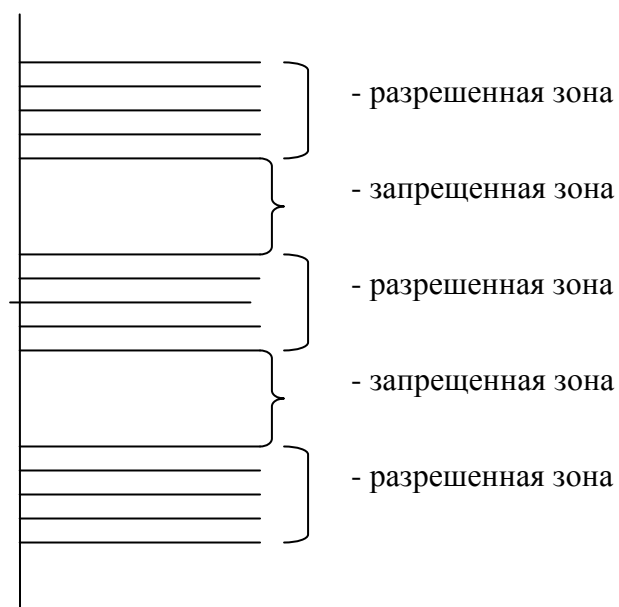


Рис.

Пока атомы какого-либо вещества изолированы друг от друга, они имеют полностью совпадающие схемы энергетических уровней. Заполнение уровней электронами осуществляется в каждом атоме независимо от заполнения аналогичных уровней в других атомах. По мере сближения атомов между ними возникает все усиливающееся взаимодействие, которое приводит к изменению положения уровней. Вместо одного одинакового для всех N атомов уровня возникают N очень близких, но не совпадающих уровней. Следовательно, каждый уровень изолированного атома расщепляется в кристалле на N густо расположенных уровней, образующих полосу или зону. В кристалле образуется столько уровней, сколько атомов в данном кристалле ($\sim 10^{26} \text{ м}^{-3}$).

В зависимости от свойств атомов равновесное расстояние между соседними атомами в кристалле может быть либо r_1 , либо r_2 . При расстоянии r_1 между разрешенными зонами возникают запрещенные. При расстоянии r_2 происходит перекрытие разрешенных зон. В перекрытой зоне число уровней равно сумме количества уровней, на которые расщепляются оба атома.

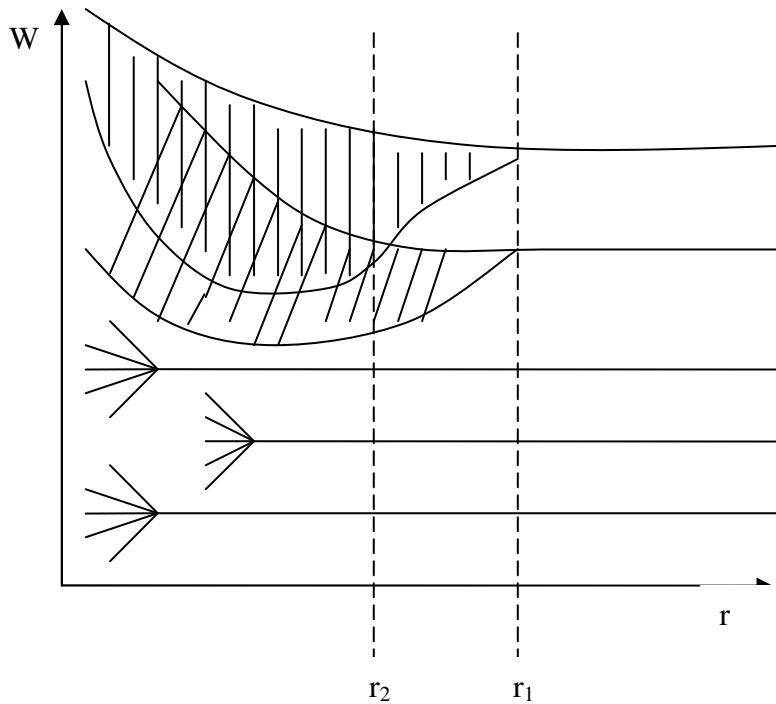


Рис.

Зонная структура энергетических уровней получается непосредственно из решения уравнения Шредингера для электрона, движущегося в периодическом силовом поле. Это поле создается решеткой кристалла. Уравнение Шредингера, учитывающее поле решетки, имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = W\psi$$

Решение уравнения Шредингера для периодического потенциала:

$$U(x+a, y, z) = U(x, y, z)$$

$$U(x, y+b, z) = U(x, y, z)$$

$$U(x, y, z+c) = U(x, y, z)$$

имеет вид: $\psi_k = U_k(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ – функция Блоха.

График зависимости энергии электрона от модуля волнового вектора – дисперсионная кривая.

Для свободных электронов

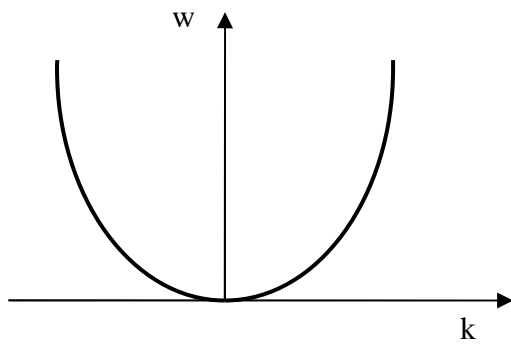


Рис.

Для электронов в периодическом поле

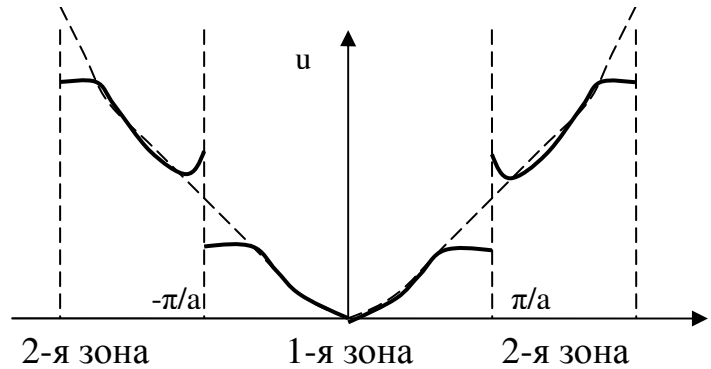


Рис.

Область k-пространства, внутри которой энергия электрона меняется непрерывно, называется зоной Бриллюэна. Спектр возможных значений энергии валентных электронов распадается на ряд разрешенных и запрещенных зон. Ширина зоны ~ 1 эВ ($\sim 1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж). Если в кристалле порядка 10^{23} атомов, то расстояние между соседними уровнями $\Delta W \sim 10^{-23}$ эВ. На каждом уровне может находиться два электрона.

Разрешенная зона, образовавшаяся из уровня, на котором находятся валентные электроны в основном состоянии, называется валентной. Более высокие разрешенные зоны – свободные. Схематически зоны металлов, полупроводников и диэлектриков можно представить следующим образом:

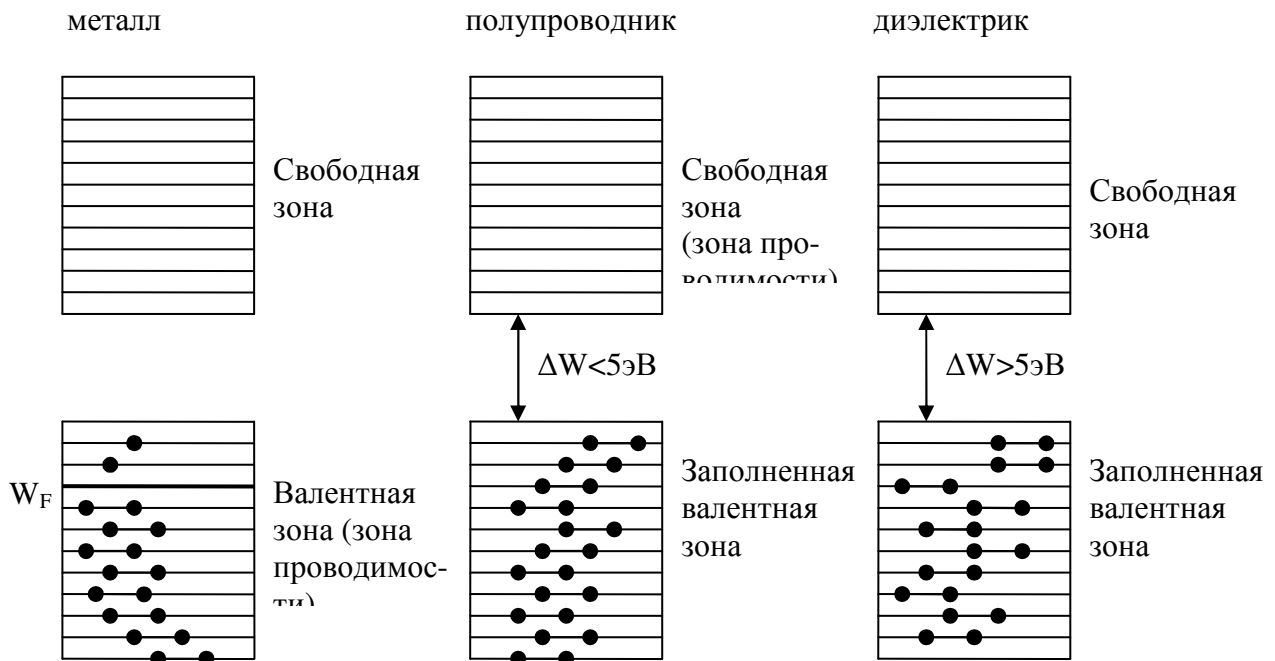


Рис.

Структура энергетических зон кристалла полностью определяет его электрические свойства. Тепловое движение электронов при $T \sim 1\text{К}$ имеет энергию $W=3/2kT \sim 10^{-4}\text{эВ}$, что позволяет электронам переходить на разрешенные уровни энергии в валентной зоне металла и свободной зоне полупроводника и участвовать в направленном движении под действием электрического поля, создавая тем самым электрический ток.

Электропроводность металлов

На электрон в кристалле, находящийся во внешнем электрическом поле напряженностью E , действует сила Кулона $F=eE$. По второму закону Ньютона

$$\frac{dp}{dt} = \sum F. \quad (1)$$

Электрону, движущемуся в кристалле, соответствует волна де Бройля с волновым числом

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad (2)$$

Из (1) и (2) следует

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar} \quad (3)$$

Скорость движения электрона – это групповая скорость волны де Бройля.

$$v_{гp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dW}{\hbar dk}$$

Ускорение электрона:

$$a = \frac{dv_{гp}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dW}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 W}{dk^2} \frac{dk}{dt}$$

Учитывая (3), имеем:

$$\frac{dv_{гp}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 W}{dk^2} F \quad (4)$$

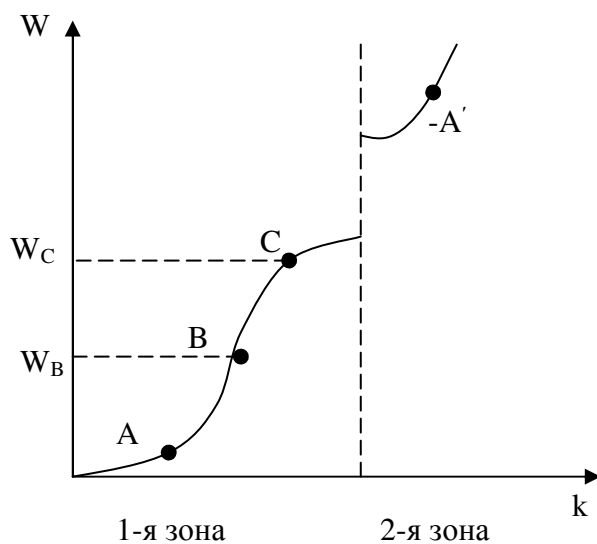
По второму закону Ньютона:

$$m \frac{dv}{dt} = F$$

Следовательно:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 W / dk^2} \quad - \quad \text{эффективная масса электрона в кристалле.}$$

Эффективная масса отличается от истинной массы, т. к. в кристалле на электрон кроме силы Кулона действует сила со стороны кристаллической решетки ($F_{\text{кристалл}}$). Зависимость эффективной массы m^* в зависимости от положения электрона внутри разрешенной зоны можно показать следующим образом:



A и A' – точки вблизи дна зоны $m_A^* = m_{A'}^* \approx m$.

B – точка перегиба; $\frac{d^2 W}{dk^2} = 0$,

следовательно:

$m_B^* \rightarrow \infty$ (внешнее поле не может изменить скорость электрона, находящегося в состоянии с энергией W_B). Вблизи потолка валентной зоны (точка C)

Рис.

$\frac{d^2 W}{dk^2} < 0$ и $m_C^* < 0$ (под совместным действием сил eE и $F_{\text{кристалл}}$), электрон, находящийся в состоянии с энергией W_C , получает ускорение, противоположное по направлению внешней силы eE .

В идеальной периодической решетке при $T=0\text{K}$ (колебания отсутствуют) сила сопротивления движению электронов отсутствует. Волна де Бройля имеет длину больше, чем период решетки ($\lambda > d$). Следовательно, решетка для волн де Бройля является оптически однородной средой, дифракция волн отсутствует.

Если в кристаллической решетке имеются неоднородности (примеси, дислокации, вакансии с $d \sim \lambda$), то появляется рассеяние волн и возникает сопротивление:

$$\rho = \rho_{\text{кол}} + \rho_{\text{прим.}}$$

$$\text{Удельная проводимость } \gamma = \frac{1}{\rho}$$

Под действием кулоновской силы $\mathbf{F}_k = e\mathbf{E}$ дрейфовая скорость

$$\mathbf{v}_{\text{др}} = \frac{1}{n} \sum \mathbf{v}_i = \text{const}, \text{ т. к. действует сила } \mathbf{F}_{\text{гр}} = -r\mathbf{v}_{\text{др}}$$

Уравнение движения

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_{\text{др}}}{dt} = -e\mathbf{E} - r\mathbf{v}_{\text{др}}$$

Если внешнее поле отсутствует, т. е. $\mathbf{E} = 0$, имеем

$$\frac{d\mathbf{v}_{\text{др}}}{dt} = -\frac{r}{m^*} \mathbf{v}_{\text{др}}$$

Решение этого уравнения:

$$\mathbf{v}_{\text{др}}(t) = \mathbf{v}_{\text{др}}(0) e^{-\frac{r}{m^*} t}$$

Обозначим $\tau = \left(\frac{r}{m^*}\right)^{-1}$ - время релаксации. При установившемся движении

$$\frac{d\mathbf{v}_{\text{др}}}{dt} = 0.$$

$$e\mathbf{E} + \frac{m^*}{\tau} \mathbf{v}_{\text{др}} = 0$$

Отсюда

$$\mathbf{v}_{\text{др}} = \frac{e\mathbf{E}\tau}{m^*}$$

Плотность тока

$$\mathbf{j} = en\mathbf{v}_{\text{др}} = \frac{n e^2 \tau}{m^*} \mathbf{E}, \text{ где } \tau = \frac{1}{T}, \text{ что соответствует экспериментальным}$$

данным.

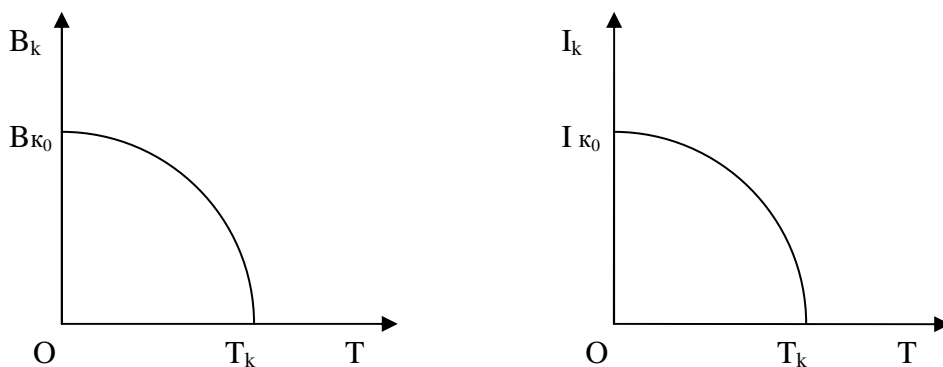
Сверхпроводимость

При $T \rightarrow 0\text{K}$ вещество переходит в сверхпроводящее состояние. Это явление открыто в 1911г (Камерлинг-Оннес).

Для сверхпроводящего состояния характерно то, что магнитное поле не проникает в толщу сверхпроводника.

Эффект Майсснера – при охлаждении сверхпроводника, помещенного в магнитное поле, в момент перехода в сверхпроводящее состояние магнитное поле выталкивается из образца и магнитная индукция в образце обращается в ноль. (Сверхпроводник – идеальный диамагнетик; $\mu=0$).

Сильное внешнее магнитное поле B_k разрушает сверхпроводящее состояние.



Если усиливать ток, текущий через сверхпроводник, то при значении тока I_k сверхпроводящее состояние тоже разрушается.

Теория сверхпроводимости создана в 1957г. Бардиным, Купером и Шриффером (теория БКШ). Электрон в металле, кроме кулоновского отталкивания, испытывает особый вид притяжения: электрон деформирует решетку, притягивая положительные ионы, которые в свою очередь притягивают второй электрон, в результате электроны проводимости образуют куперовские пары. Электроны в этой паре имеют противоположно направленные спины и спин пары равен нулю, и она представляет собой бозон. Бозоны накапливаются в основном состоянии, их трудно перевести в возбужденное состояние. Следовательно, куперовские пары, придя в согласованное движение, остаются в этом состоянии неограниченно долго.

Такое согласованное движение пар и есть ток проводимости. Расстояние между электронами пары порядка $r \sim 10^{-4}$ см, что в 10^4 раз больше периода решетки ($d \sim 10^{-8}$ см). Примерно 10^6 куперовских пар перекрываются, занимая общий объем. В куперовские пары объединяются не все электроны проводимости. При $T \neq 0\text{K}$ имеется вероятность, что пара будет разрушена, следовательно, наряду с куперовскими парами имеются и электроны проводимости. С увеличением T доля электронов проводимости увеличивается и при $T > T_k$ все пары разрушаются и сверхпроводящее состояние становится невозможно.

Магнитный поток, связанный со сверхпроводящим кольцом (или цилиндром) квантован:

$$\Phi = n \frac{2\pi\hbar}{q}, \quad n=1, 2, \dots$$

квант магнитного потока

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{q}, \quad \text{где } q=2e.$$

Примеры сверхпроводников:

1. Химические элементы:

Nb ($T_{кр} \sim 9,22\text{K}$) Ir ($T_{кр} \sim 0,140\text{K}$)

2. Сплавы:

CuS; Au₂Bi; Nb₃Ge ($T_{кр} \sim 22,3\text{K}$)

3. Керамики:

La-Ba-Cu-O ($T_{кр} > 30\text{K}$)

La-Sr-Cu-O ($T_{кр} = 40-50\text{K}$).

Контактные и термоэлектрические явления

1. Работа выхода.

Валентные электроны и электроны проводимости в металле находятся в потенциальной яме. Потенциальное поле в виде ямы образуют кулоновские силы. Они проявляются тогда, когда энергия отдельных электронов оказывается больше потенциального барьера и эти электроны покидают приповерхностные слои металла. При этом поверхность металла приобретает

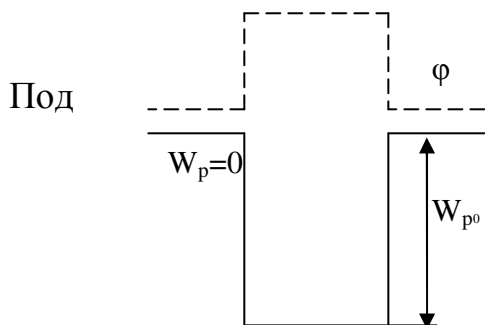


Рис.

положительный заряд (потенциал), который не позволяет электронам перемещаться свободно. Действием кулоновских сил электрон возвращается обратно в металл. При выходе электрона из металла совершается работа против действия сил Кулона и эта работа идет на увеличение потенциальной энергии электрона.

Полагая потенциальную энергию электронов вне металла равной нулю, получим для электронов в металле потенциальную яму глубиной $-W_{p0} < 0$.

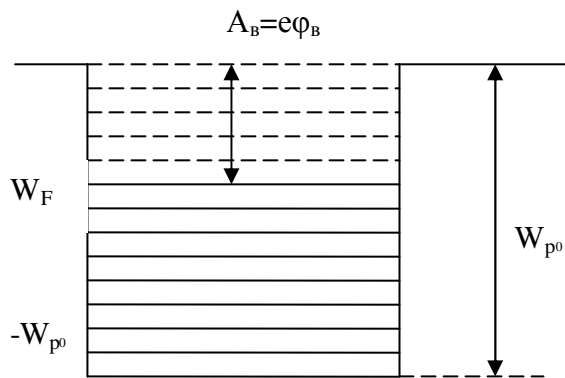
Потенциал в яме определяется выражением

$$\varphi = -\frac{W_{p0}}{-e} > 0.$$

Полная энергия электрона в металле складывается из потенциальной и кинетической энергии, максимальная кинетическая энергия электронов в металле есть энергия Ферми.

$$W_{\max} = -W_{p0} + W_F$$

Чтобы электрон вышел из металла, необходимо совершить работу, минимальное значение которой (для электронов, находящихся на уровне Ферми) называется работой выхода:



$$A_B = -e\phi_B$$

Отсюда, потенциал выхода

$$\phi_B = \frac{W_{p0} - W_F}{e}$$

Работа выхода A_B и потенциал

выхода ϕ_B зависят от температуры, т. к. от температуры зависят и W_F и W_{p0} ; от состояния поверхности и от пленок, нанесенных на поверхность (например, покрытие оксидами Ca, Sr, Ba снижает работу выхода с 4,5эВ до 1,5-2эВ).

Термоэлектронная эмиссия

При повышении температуры от $T=0K$ верхняя граница распределения Ферми-Дирака расплывается и появляется большое число электронов, способных совершить работу выхода и покинуть поверхность металла.

Термоэлектронная эмиссия – испускание электронов поверхностью нагретого металла. Исследования термоэлектронной эмиссии проводятся с помощью вакуумного диода.

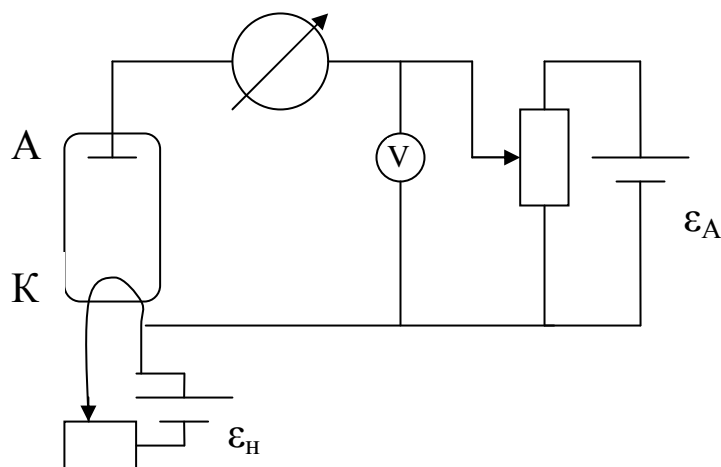


Рис.

Вольт-амперная характеристика диода:

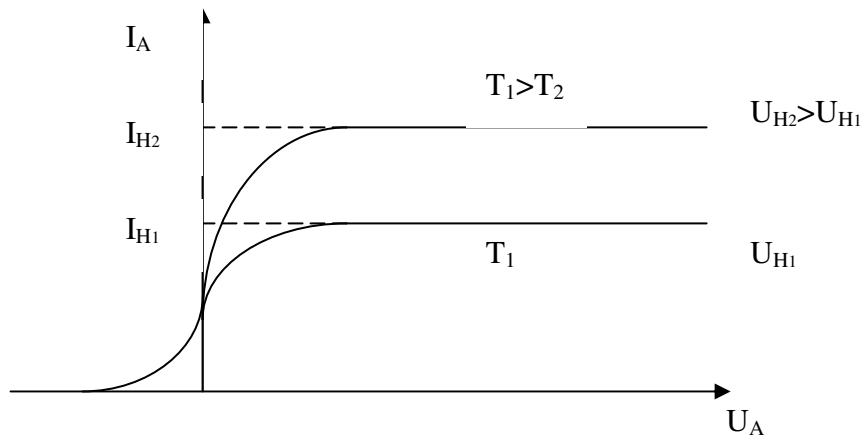


Рис.

Начальный участок вольт-амперной характеристики подчиняется закону Богуславского-Ленгмюра (закон трех вторых)

$$I_A = kU_A^{3/2}$$

При увеличении анодного напряжения U_A при некотором значении анодный ток перестает расти, достигая насыщения I_H . При этом все электроны, покидающие в результате термоэлектронной эмиссии катод, достигают анода. Плотность тока насыщения определяется формулой Ричардсона-Дэшмана

$$j_{\text{нас}} = AT^2 \exp\left(-\frac{e\phi_B}{kT}\right)$$

Ток насыщения сильно зависит от температуры и работы выхода, т. к. $j_{\text{нас}} = Ne$, где N – число электронов, эмитируемых в единицу времени с единицы площади катода. При подаче на диод переменного напряжения U_A , диод служит для выпрямления тока и называется кенотроном.

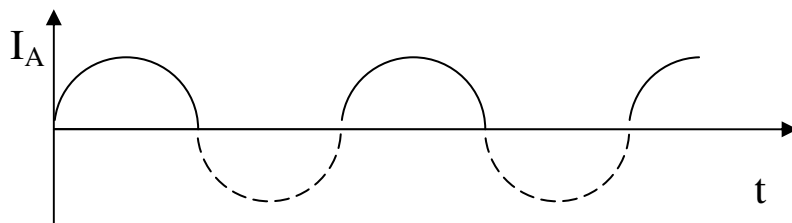


Рис.

Триод может служить для усиления, генерации и преобразования переменного тока.

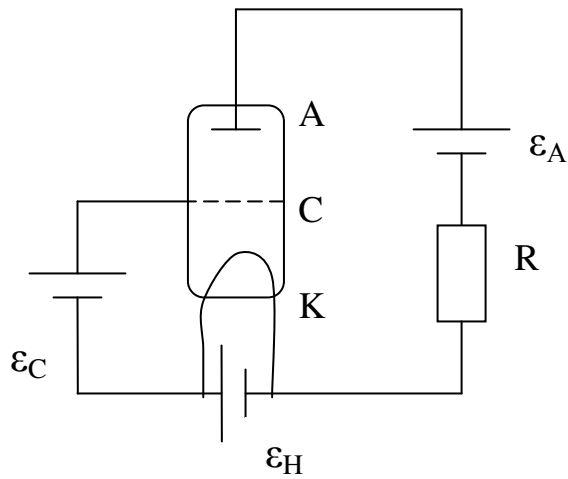


Рис.

Контактная разность потенциалов

Если привести два разных металла в соприкосновение, между ними возникает разность потенциалов, которая называется контактной. КРП возникает и на границе металл-полупроводник и полупроводник-полупроводник.

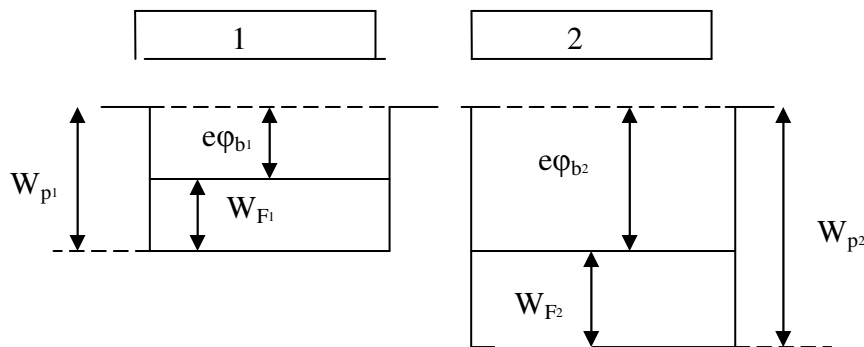


Рис.

Пусть уровень Ферми W_{F1} первого металла лежит выше, чем уровень Ферми w_{F2} второго металла. При контакте металлов электроны с высших уровней энергии в первом металле будут переходить на более низкие свободные уровни во втором металле до тех пор, пока уровни Ферми не выровняются.

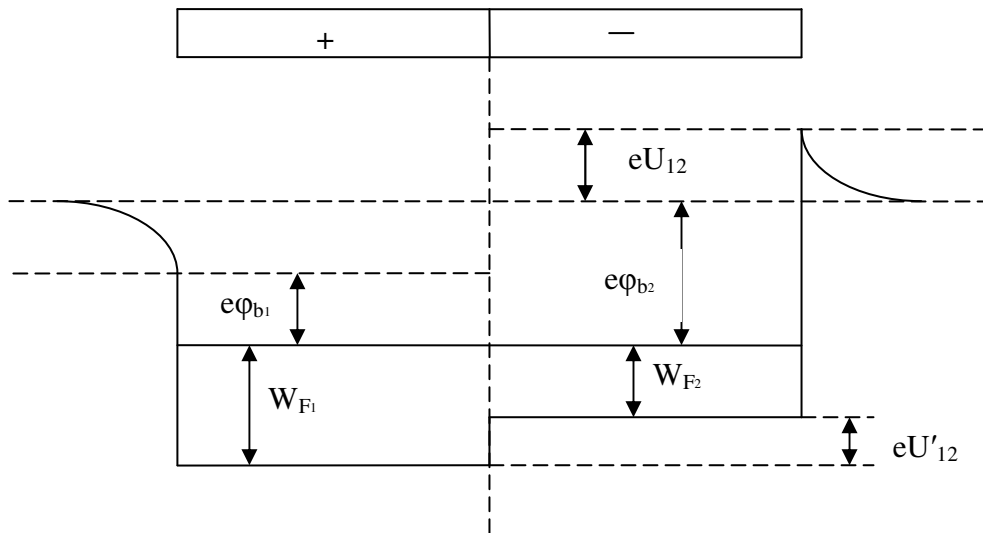


Рис.

При этом первый металл будет заряжаться положительно ($\phi_1 > 0$), второй – отрицательно ($\phi_2 < 0$). Внешняя контактная разность потенциалов

$$U_{12} = \frac{e\phi_{b2} - e\phi_{b1}}{e} = \phi_{b2} - \phi_{b1} = \frac{A_{b2} - A_{b1}}{e}$$

Внутренняя контактная разность потенциалов U'_{12} возникает за счет разной энергии Ферми электронов в металле

$$U'_{12} = \frac{W_{F1} - W_{F2}}{e}$$

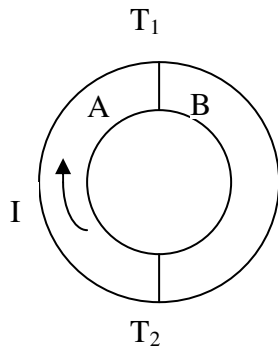
Термоэлектрические явления

Между тепловыми и электрическими процессами в металлах и полупроводниках имеется взаимосвязь, которая обуславливает явления, называемые термоэлектрическими.

Явление Зеебека

Явление Зеебека открыто в 1821 г. и заключается в возникновении термоЭДС или возникновении тока в цепи, состоящей из двух металлов, если спаи металлов поддерживаются при разной температуре.

Причины возникновения термоЭДС:



1. Зависимость уровня Ферми от температуры.
2. Диффузия электронов и дырок.
3. Увлечение электронов фононами.

Рис.

1. Уровень Ферми зависит от температуры, поэтому на спаях возникают разные значения внутренней контактной разности потенциалов и появляется контактная ЭДС.

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{конт}} &= U'_{AB}(T_1) + U'_{BA}(T_2) = \frac{1}{e} ([W_{FA}(T_1) - W_{FB}(T_1)] + [W_{FB}(T_2) - W_{FA}(T_2)]) = \\ &= \frac{1}{e} ([W_{FB}(T_2) - W_{FB}(T_1)] - [W_{FA}(T_2) - W_{FA}(T_1)]) \end{aligned}$$

Следовательно

$$\epsilon_{\text{конт}} = \int_{T_1}^{T_2} \frac{1}{e} \frac{dW_{FB}}{dT} dT - \int_{T_1}^{T_2} \frac{1}{e} \frac{dW_{FA}}{dT} dT$$

2. Внутри проводника, где создан градиент температуры, возникает ЭДС за счет диффузии быстрых электронов из более нагретого конца к более холодному.

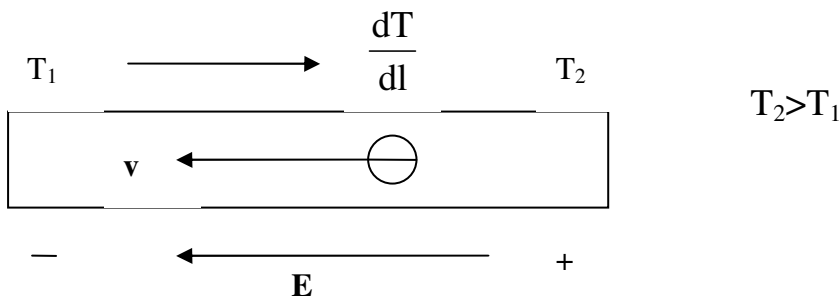


Рис.

(1) $E = -\beta \frac{dT}{dl}$, для электронов $\beta > 0$, для дырок $\beta < 0$.

Фононы перемещаются из более нагретого конца проводника к более холодному, при этом увлекают за собой электроны, чем вносят вклад в формулу (1).

За счет диффузии электронов и дырок и увлечения электронов фононами в каждом проводнике возникает ЭДС.

$$\varepsilon_{2A1} = - \int_2^1 \beta_A \frac{dT}{dl} dl = \int_{T_1}^{T_2} \beta_A dT, \text{ следовательно } \beta = \frac{d\varphi}{dT}$$

$$\varepsilon_{1B2} = - \int_1^2 \beta_B \frac{dT}{dl} dl = - \int_{T_1}^{T_2} \beta_B dT$$

Суммируя все ЭДС в цепи, получим:

$$\varepsilon_T = \varepsilon_{\text{конг}} + \varepsilon_{2A1} + \varepsilon_{1B2} = \int_{T_1}^{T_2} \left(\beta_A - \frac{1}{e} \frac{dW_A}{dT} \right) dT - \int_{T_1}^{T_2} \left(\beta_B - \frac{1}{e} \frac{dW_{FB}}{dT} \right) dT = \int_{T_1}^{T_2} \alpha_A dT -$$

$$\int_{T_1}^{T_2} \alpha_B dT = \int_{T_1}^{T_2} (\alpha_A - \alpha_B) dT = \int_{T_1}^{T_2} \alpha_{AB} dT \sim \alpha_{AB}(T_2 - T_1),$$

где $\alpha_A = \beta_A - \frac{1}{e} \frac{dW_F}{dT}$ - коэффициент ТЭДС

$\alpha_{AB} = \alpha_A - \alpha_B$ - дифференциальная (удельная) термоЭДС.

Для металлов $\alpha_{AB} \sim 10^{-5} - 10^{-4}$ В/к; для полупроводников $\alpha_{AB} = (1 - 1,5) 10^{-3}$ В/к.

Явление Зеебека используется для измерения температур с помощью термопар. Один спай термопары поддерживают при постоянной температуре (обычно 0°C), другой помещают в среду, температуру которой надо измерить. О величине температуры судят по величине термотока. С помощью термопар можно измерять температуры с точностью до сотых долей кельвина как высокие, так и низкие.

Явление Пельтье

Заключается в том, что при протекании тока через цепь, составленную из разнородных металлов или полупроводников, в одних спаях выделяется, а в других поглощается тепло. Это явление обратное явлению Зеебека.

$$Q_{AB} = P_{AB}q = P_{AB}It$$

P_{AB} – коэффициент Пельтье.

При перемене направления тока Q меняет свой знак (на тех спаях, где тепло выделялось, теперь поглощается). Следовательно,

$$P_{AB} = -P_{BA}.$$

Объяснение явления Пельтье состоит в следующем: носители тока по разные стороны от спая имеют различную энергию, т. к. различны уровни Ферми. При переходе в проводник с более низким уровнем Ферми носители заряда отдают часть энергии кристаллической решетке в области спая и область спая нагревается. На другом спае носители переходят в область с большей энергией, часть энергии заимствуют у решетки и спай охлаждается.

Явление Томсона

При протекании тока по однородному проводнику, вдоль которого создан градиент температуры, выделяется или поглощается количество теплоты

$$dQ = \tau I \frac{dT}{dl} dl$$

где τ – коэффициент Томсона.

Если ток течет в направлении возрастания температуры, то электроны движутся из области с более высокой температурой (энергией) в область, где энергия электронов ниже, и отдают свою энергию решетке, что приводит к

выделению тепла. Если носителями тока являются дырки, то эффект будет иметь обратный знак и тепло будет поглощаться.

Собственная и примесная проводимость полупроводников

Чистые, беспримесные полупроводники имеют электронно-дырочную проводимость – собственная проводимость.

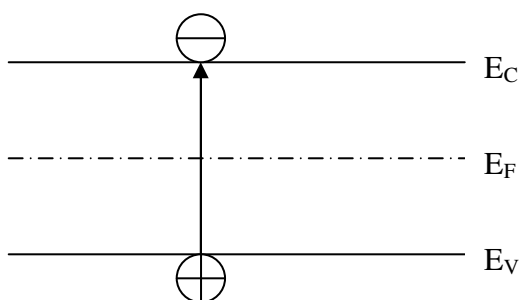


Рис.

Под действием излучения, температуры электроны переходят из валентной зоны в зону проводимости и в валентной зоне появляются положительные квазичастицы – дырки.

Появление дырок удваивает число носителей заряда и появляется проводимость двух видов: электронная (n-типа) и дырочная (p-типа).

В технике широкое применение нашли полупроводники с примесями других элементов (легированные полупроводники). Проводимость, обусловленная примесями, называется примесной. Примеси создают дополнительные уровни в запрещенной зоне и резко увеличивают проводимость полупроводников. Примеси бывают двух типов:

1. В кристалл Ge вводятся атомы As (Ge – 4-х валентный; As – 5-ти валентный).

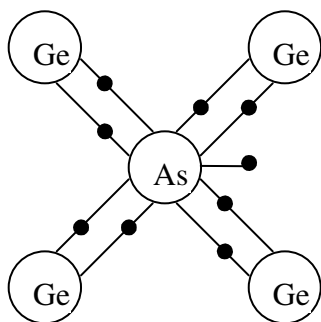


Рис.

Один электрон As не образует связи и легко отрывается от атома и становится электроном проводимости, при этом дырка не образуется. Примеси, валентность которых больше на единицу, чем у основных атомов, называются донорами – источниками электронов. В запрещенной зоне возникает примесный уровень E_d ($\Delta E_d \ll \Delta E$).

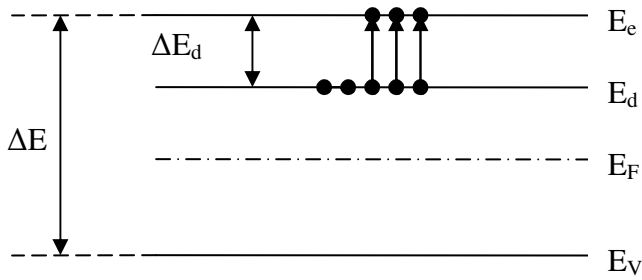
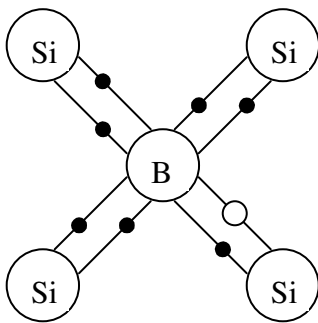


Рис.

Дырки локализируются на неподвижных атомах As и в проводимости не участвуют. Таким образом в полупроводниках возникает электронная примесная проводимость n-типа и полупроводник называется n-типа.

2. В кристалл Si (валентность 4) вводят атомы В (валентность 3).



У бора не хватает одного электрона для образования ковалентной связи и образуется дырка, которая перемещается под действием поля.

Рис.

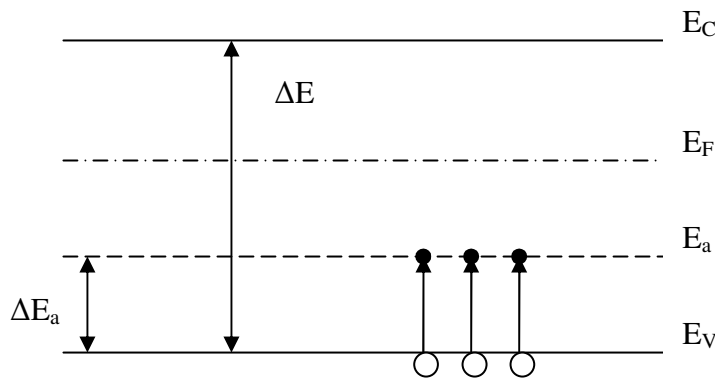


Рис.

$\Delta E_a \ll \Delta E$; E_a – примесный акцепторный уровень. Электроны, переходя на E_a , связываются и не могут участвовать в проводимости.

Примеси, валентность которых меньше на единицу, чем у основных атомов, называются акцепторными. В таких полупроводниках преобладает дырочная проводимость (полупроводники p-типа).

Контакт электронного и дырочного полупроводников (p-n переход)

Контакт двух полупроводников p- и n-типа называют электронно-дырочным или p-n переходом.

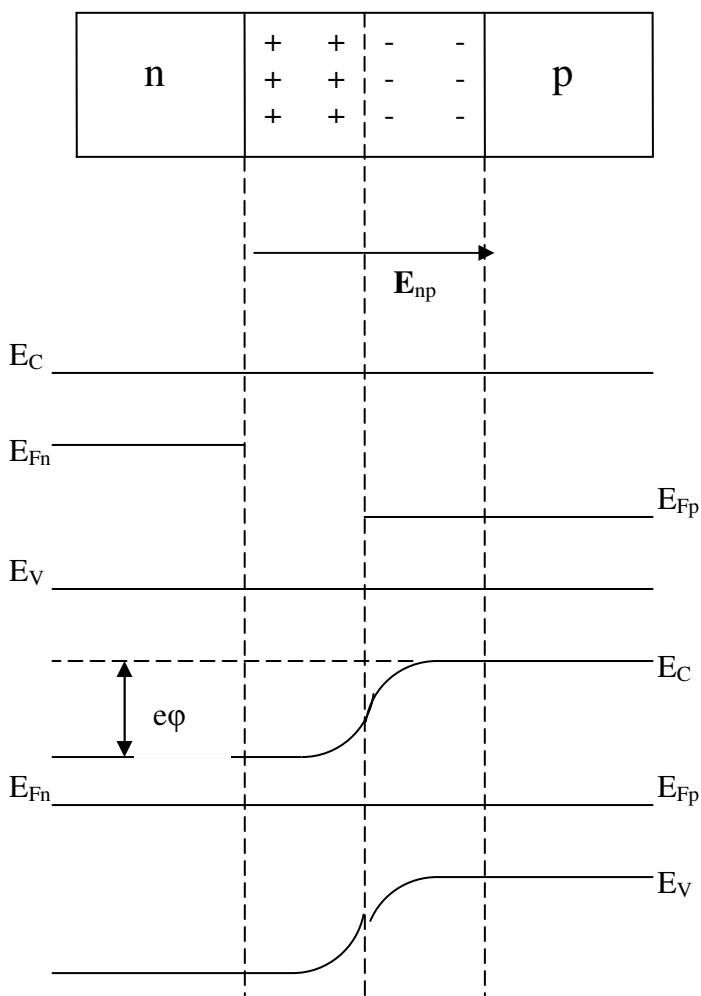


Рис.

При соединении двух полупроводников разного типа проводимости создается p-n переход с односторонней проводимостью. За счет разности концентраций основных носителей заряда происходит их диффузия в приграничной области перехода: электроны из n-полупроводника переходят в p-полупроводник и дырки из p-полупроводника переходят в n-полупроводник. Диффундируя во встречных направлениях через приграничный слой, электроны и дырки рекомбинируют

друг с другом. Следовательно, p-n переход оказывается сильно обедненным носителями тока и приобретает большое сопротивление. На границе между областями возникает двойной электрический слой, образованный отрицательными ионами акцепторной примеси, заряд которых не компенсируется дырками, и положительными ионами донорной примеси, заряд которых не компенсируется электронами.

Напряженность поля в слое E_{np} . При определенной толщине p-n перехода наступает равновесие, характеризуемое выравниванием уровней Ферми для

полупроводников. В результате энергетические зоны искривляются и в области перехода образуется потенциальный барьер $e\phi$. При нормальных условиях носители заряда не могут преодолеть этот барьер и образуется запирающий слой.

Включим переход в цепь, когда внешнее поле противоположно полю р-п перехода. В этом случае говорят, что переход смещен в прямом направлении.

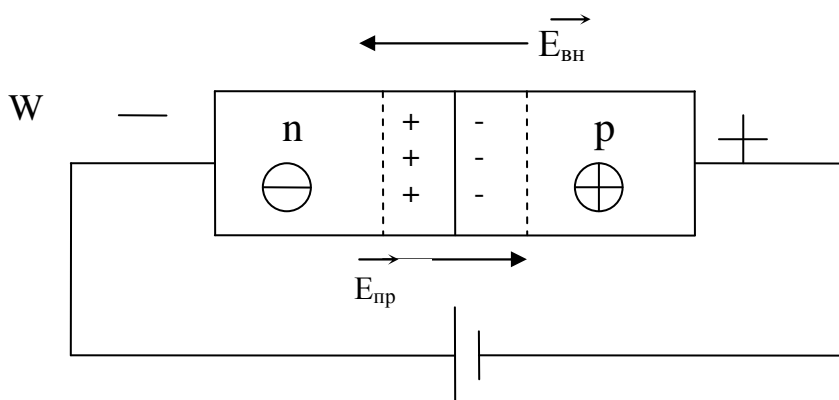


Рис.

Электроны и дырки рекомбинируют друг с другом и ширина р-п перехода уменьшается. Следовательно, уменьшается и его сопротивление. При возрастании напряжения ток через переход увеличивается. Такое направление называется пропускным.

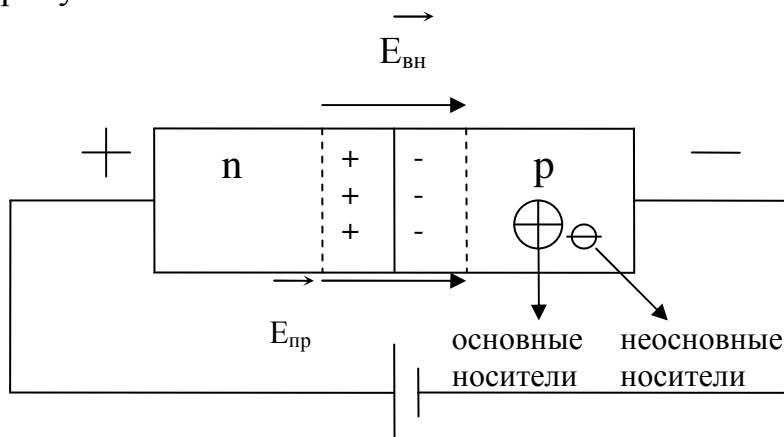


Рис.

При включении в цепь, когда внешнее поле совпадает с полем р-п перехода, толщина запирающего слоя и его сопротивление резко возрастают, ток через переход практически не идет. Такое поле называют запирающим.

Но и в р – области и в n – области имеется некоторое количество

неосновных носителей, и они осуществляют перенос электрического заряда, следовательно, очень слабый обратный ток имеется.

Вольт – амперная характеристика p-n – перехода имеет вид.

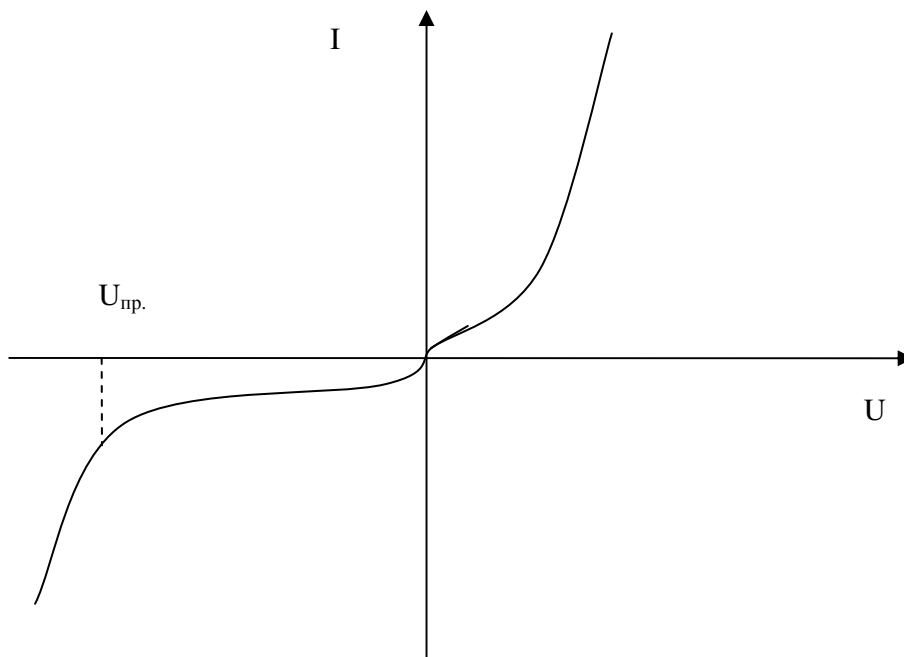


Рис.

При некотором напряжении, равном $U_{пр.}$, ток через переход резко возрастает. Это обусловлено тем, что неосновные носители приобретают энергию, достаточную для образования пары e-g и, следовательно, ток будет лавинообразно возрастать.

Рассмотрим работу транзистора. Транзисторы бывают n-p-n-типа и p-n-p-типа.

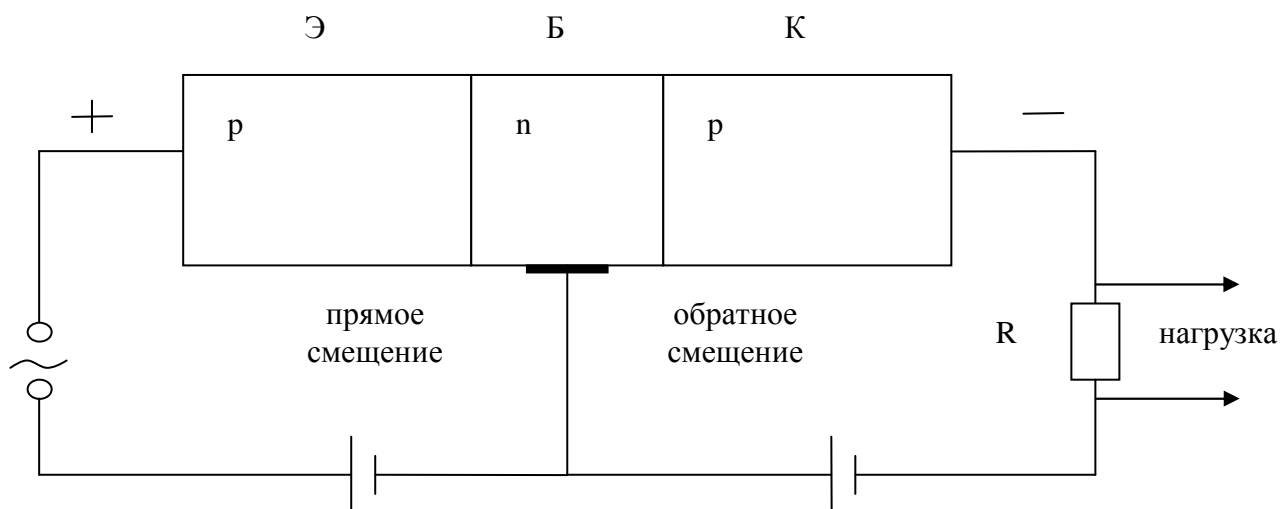


Рис.

Дырки попадают в базу за счет того, что толщина базы мала, они почти не

рекомбинируют с e и за счет диффузии попадают в коллектор. В коллекторе дырки увлекаются электрическим полем и замыкают в цепь. Сила тока в цепи эмиттера мала, т.к. площадь базы в вертикальном сечении много больше чем в горизонтальном. Сила тока в коллекторе равна силе тока в эмиттере и меняется вместе с ней. Сопротивление нагрузки R можно сделать большим.

Управляя током эмиттера с помощью переменного напряжения, мы получим синхронное изменение напряжения на нагрузке R . При большом R изменение напряжения на сопротивлении в десятки тысяч раз превосходит изменение напряжения в цепи эмиттера. Мощность, выделяемая на нагрузке много больше мощности в цепи эмиттера. Такая схема представляет собой усиление по мощности.

Фотоэффект в полупроводниках.

Фотоэффект в полупроводниках – это увеличение электропроводности под действием электромагнитного излучения.

Собственная фотопроводимость в собственных полупроводниках возникает, когда энергия фотона $h\nu$ больше ширины запрещенной зоны

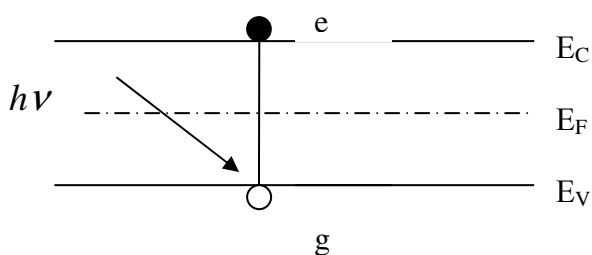


Рис.

($h\nu \geq \Delta E$). При этом электрон попадает в зону проводимости, а валентной зоне образуется дырка. Следовательно, проводимость полупроводника увеличивается, т.к.

увеличивается число носителей заряда. Примесная фотопроводимость в примесных полупроводниках возникает в случаях, если энергия фотона $h\nu \geq \Delta E_d$ (для донорных полупроводников) и $h\nu \geq \Delta E_a$ (для акцепторных полупроводников).

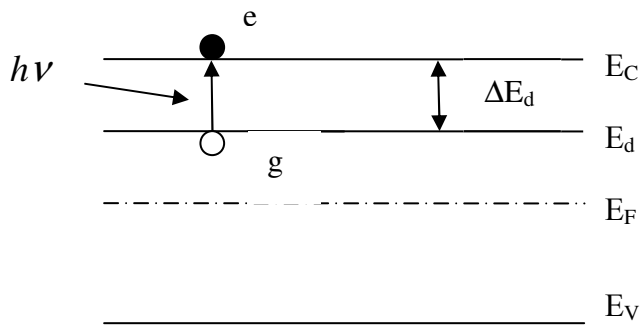


Рис.

Если $h\nu \geq \Delta E_d$, то электрон с донорного уровня попадает в зону проводимости, а на донорном уровне образуется дырка, количество электронов в зоне проводимости

увеличивается, следовательно,

увеличивается электропроводность (n – полупроводник).

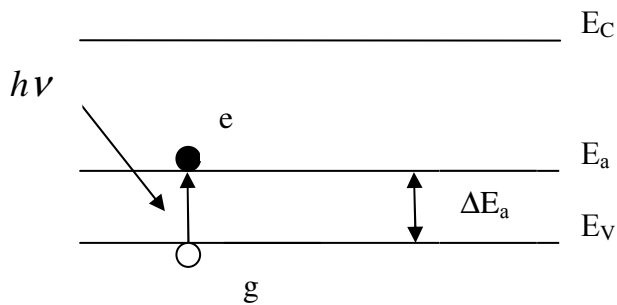


Рис.

Если $h\nu \geq \Delta E_a$, то электрон из валентной зоны попадает на акцепторный уровень, а в валентной зоне образуется дырка, количество дырок в валентной зоне увеличивается, следовательно, увеличивается

электропроводность (p – полупроводник).

Красная граница фотопроводимости.

$$\lambda_{кр} = \frac{ch}{\Delta E} \text{ - для собственных полупроводников.}$$

$$\lambda_{кр} = \frac{ch}{\Delta E_{пр}} \text{ - для примесных полупроводников.}$$

Элементы физики атомного ядра.

1. Заряд, размер и состав ядра. Массовое и зарядовое числа.

Заряд ядра Ze ; где e - заряд протона, Z - зарядовое число ядра (число

протонов в ядре или порядковый номер в таблице Менделеева). Ядро состоит из протонов и нейтронов – нуклонов. Масса протона

$$m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1836 m_e; \quad \text{масса нейтрона}$$

$$m_n = 1,6749 \cdot 10^{-27} \text{ кг} = 1839 m_e; \quad (m_n = m_p + 2,5 m_e).$$

Массовое число (A) – это общее число протонов и нейтронов (нуклонов) в ядре. Число нейтронов в ядре $N = A - Z$. Ядро условно обозначается ${}^A_Z X$.

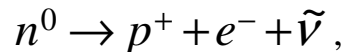
Протоны (p^+) имеют собственный магнитный момент (ядерный магнетон).

$$\mu_p = \frac{1}{660} \mu_B.$$

Собственный магнитный момент нейтрона:

$$\mu_n = \frac{1}{900} \mu_B.$$

В свободном состоянии нейтроны самопроизвольно распадаются



где $\tilde{\nu}$ - антинейтрино.

Изотопы – это ядра, имеющие одинаковые зарядовые числа Z , но разные массовые числа A .

Изобары – ядра, имеющие одинаковые массовые числа A , но разные зарядовые числа Z .

Радиус ядра - $R = R_0 \cdot A^{1/3}$, где $R_0 = (1,3 \div 1,7) \cdot 10^{-15} \text{ м}$.

Плотность ядерного вещества составляет $\sim 10^{17} \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

2. Ядерные силы и их свойства.

Ядерные силы – это силы притяжения между нуклонами в ядре, существенно превышающие силы кулоновского отталкивания протонов. В этом суть сильного взаимодействия. Ядерные силы обладают свойствами: это силы притяжения, короткодействующие силы (радиус действия $\sim 10^{-15}$ м), имеют неэлектрическую природу и зарядовую независимость, не являются центральными, зависят от ориентации спинов взаимодействующих нуклонов, им характерно свойство насыщения (каждый нуклон в ядре взаимодействует с ограниченным числом нуклонов).

Дефект массы и энергия связи ядер.

Масса ядра всегда меньше суммы масс нуклонов, составляющих это ядро.

$$m_{\text{я}} < Zm_p + (A - Z)m_n$$

$$\Delta m = [Zm_p - (A - Z)m_n] - m_{\text{я}} > 0.$$

Δm - дефект массы. Всякому изменению массы соответствует изменение энергии

$$\Delta E = \Delta m \cdot c^2.$$

Это энергия связи нуклонов в ядре.

$$E_{\text{св}} = \Delta E = c^2 \{ [Zm_p - (A - Z)m_n] - m_{\text{я}} \}$$

Эта энергия связи выделяется при образовании ядра и такая же энергия требуется для расщепления ядра на нуклоны. Удельная энергия связи ядра

$\varepsilon = \frac{E_{\text{св}}}{A}$, при этом максимальное значение $\varepsilon \sim 8,7$ у ядер с $A = 50 - 60$. Это

наиболее устойчивые ядра. Тяжелые и легкие ядра менее устойчивы, поэтому энергетически выгодны процессы деления тяжелых ядер и слияния легких ядер.

Момент импульса ядра и его магнитный момент.

Ядро обладает собственным моментом импульса (спином), равным

$$L_{яд} = \sqrt{I(I+1)} \hbar,$$

где I - внутренне спиновое квантовое число, принимающее целые значения для ядер с четными массовыми числами A , и полуцелые значения для ядер с нечетными массовыми числами A . Спин ядра складывается из спинов нуклонов, обладающими магнитными моментами, определяющие магнитный момент ядра.

$$P_{m\text{яд}} = g_{яд} \cdot L_{яд},$$

здесь $g_{яд}$ - ядерное гиромагнитное соотношение. Во внешнем магнитном поле наблюдается пространственное квантование проекции магнитных моментов ядер, что приводит к расщеплению энергетических уровней ядер (появление так называемой сверхтонкой структуры спектра ядер).

Закономерности и происхождение

α -, β - и γ -излучения.

Радиоактивность – самопроизвольное превращение неустойчивых протонов одного химического элемента в изотопы другого элемента с испусканием излучений и частиц.

Естественная радиоактивность – радиоактивность существующих в природе изотопов.

Искусственная радиоактивность – радиоактивность изотопов, полученных в результате ядерных реакций.

При радиоактивном распаде материнское ядро самопроизвольно превращается в дочернее. Между искусственной и естественной радиоактивностью нет принципиального различия. Процесс радиоактивного распада в обоих случаях подчиняется одинаковым законам.

Закон радиоактивного распада.

Отдельные радиоактивные ядра претерпевают превращения независимо друг от друга.

Число ядер dN , распадающихся за малый промежуток времени dt пропорционально числу ядер и этому промежутку времени:

$$dN = -\lambda N dt \quad (1)$$

λ - постоянная распада (вероятность распада ядра за 1 с).

В уравнении (1) разделим переменные и проинтегрируем:

$$\int_{N_0}^N \frac{dN}{N} = -\lambda dt$$

$$\ln \frac{N}{N_0} = -\lambda t$$

$$\frac{N}{N_0} = e^{-\lambda t}$$

Отсюда $N = N_0 e^{-\lambda t}$ - закон радиоактивного распада.

Время, за которое распадается половина первоначального количества ядер, называется периодом полураспада. Это время определяется из условия:

$$\frac{1}{2}N_0 = N_0 e^{-\lambda T}; \quad \frac{1}{2} = e^{-\lambda T}$$

Потенцируя это выражение, получим:

$$\ln 2 = \lambda T$$

$$\text{Отсюда: } T = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

Здесь N_0 - число ядер в начальный момент времени ($t = 0$).

N - число ядер в момент времени t .

$\tau = \frac{1}{\lambda}$ - среднее время жизни одного ядра.

Рассмотрим виды распадов.

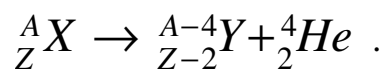
α -распад – испускание ядрами α -частиц (ядра гелия ${}^4_2\text{He}$), движущихся со скоростью $\sim 10^7$ м/с.

α -распад:

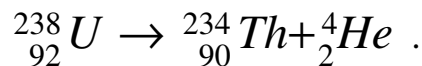
а) Обладает высокой ионизирующей способностью;

б) Малая проникающая способность;

в) Происходит по схеме (правило смещения):



г) наблюдается у тяжелых ядер ($A > 200$; $Z > 82$)



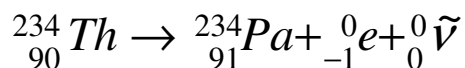
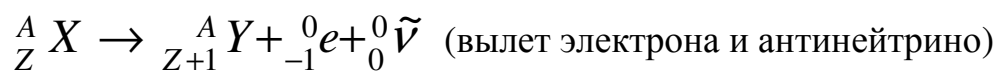
д) результат туннельного эффекта (α -частица проходит через потенциальный барьер ядерных сил);

е) характеризует сильная зависимость между периодом полураспада и энергией вылетающих частиц ($T_{1/2} \sim E$).

β -распад – объединяет электронный (β_-) и позитронный (β_+) распад и электронный захват (e -захват).

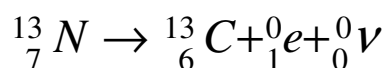
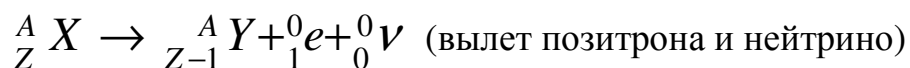
Электронный распад.

Электронный распад протекает по схеме:



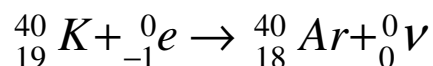
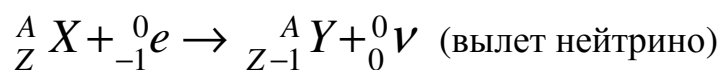
Позитронный распад.

Позитронный распад протекает по схеме:



Электронный захват.

Электронный захват протекает по схеме:



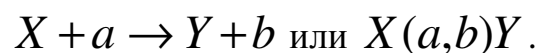
β -излучение представляет собой поток электронов (позитронов), движущихся со скоростью $\sim 0,99c \frac{m}{c}$; является результатом слабого взаимодействия; обладает меньшей, чем α -распад, ионизирующей способностью и большей проникающей способностью.

γ -излучение – это жесткое электромагнитное излучение (жесткое рентгеновское излучение), энергия которого испускается при переходах ядер из

возбужденного состояния в основное. γ -излучение не является самостоятельным видом излучения, а сопровождает α - и β -распады, не вызывает изменение ни массового числа A , ни зарядового числа Z . Длина волны γ -излучения $\lambda \leq 10^{-2}$ нм, энергия $h\nu_{\gamma} \sim 10 \text{ кэВ} \div 5 \text{ МэВ}$. γ -лучи испускаются дочерними ядрами, которые в момент их образования оказываются возбужденными.

Ядерные реакции и законы сохранения.

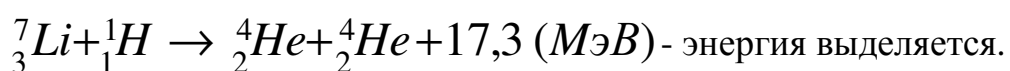
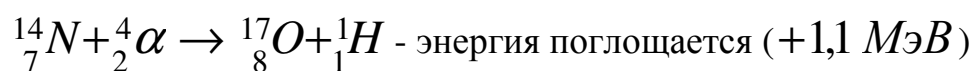
Ядерные реакции представляют собой превращения атомных ядер при взаимодействии друг с другом, элементарными частицами или γ -квантами. Наиболее распространенным видом ядерной реакции является взаимодействие легкой частицы a с ядром X , в результате которого образуется легкая частица b и ядро Y



В любой ядерной реакции выполняются:

1. закон сохранения электрических зарядов;
2. закон сохранения массовых чисел;
3. закон сохранения энергии, импульса, момента импульса.

Ядерные реакции могут сопровождаться либо выделением (экзотермическая), либо поглощением (эндотермическая) энергии. Например:



Ядерные реакции классифицируются:

1) по роду участвующих частиц: нейтронов, протонов, α -частиц, γ -квантов.

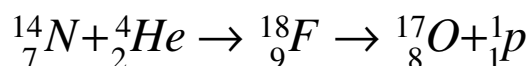
2) по энергии частиц, вызывающих реакции: малые ($E \sim \text{эВ}$), средние ($E \sim 1 \text{ МэВ}$), высокие ($E \sim 10^3 \text{ МэВ}$).

3) по роду участвующих ядер: легкие ($A \leq 50$), средние ($50 < A < 100$), тяжелые ($A \geq 100$).

4) По характеру происходящих ядерных превращений (испускание нейтронов, заряженных частиц и т.д.).

Возможна ядерная реакция, происходящая по схеме

$X + a \rightarrow C \rightarrow Y + b$, здесь C - компаунд - ядро.

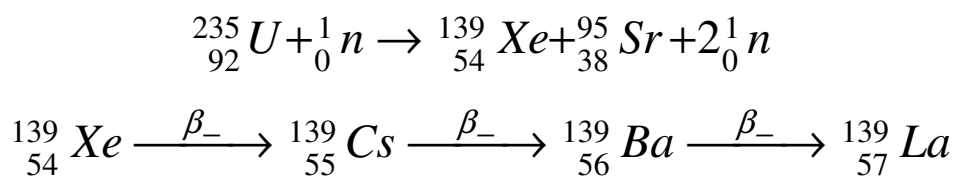


Реакция деления ядер.

Реакция деления ядер заключается в том, что под действием нейтронов тяжелое ядро делится на несколько более легких ядер. Особенности реакций деления:

1. испускание 2-3 вторичных нейтрона – нейтроны деления;
2. осколки деления являются радиоактивными – испытывают β -распад.

Примеры реакций деления:



3. выделение большого количества энергии $\sim 1,1 \text{ МэВ}$ на один нуклон. Эта энергия распределяется между осколками реакции деления и нейтронами деления.

Цепная реакция деления.

Цепная реакция – это ядерная реакция, в которой частицы, вызывающие реакцию, образуются как продукты этой реакции. Цепная реакция характеризуется коэффициентом размножения нейтронов k , который представляет собой отношение числа нейтронов в данном поколении к их числу в предыдущем поколении.

При $k > 1$ - идет развивающаяся реакция, число делений непрерывно растет.

При $k = 1$ - идет самоподдерживающаяся реакция.

При $k < 1$ - идет затухающая реакция.

Коэффициент k зависит от природы делящегося вещества, массы, размеров и формы активной зоны.

Критические размеры – это минимальные размеры активной зоны.

Критическая масса – минимальная масса вещества, при которой возможна цепная реакция.

Виды взаимодействия и классы элементарных частиц.

Известны четыре вида взаимодействия между элементарными частицами: сильное, электромагнитное, слабое и гравитационное. Интенсивность

взаимодействия характеризуется константой взаимодействия, которая определяет вероятность процессов, обусловленных данным видом взаимодействия.

Сильное взаимодействие – обеспечивает связь нуклонов в ядре. Константа сильного взаимодействия ~ 10 , радиус действия $\sim 10^{-13}$ см.

Электромагнитное взаимодействие – характеризует взаимодействие двух электронов (или как сильно связан электрон с электромагнитным полем). Константа взаимодействия $\sim 10^{-2}$, радиус действия не ограничен ($r = \infty$).

Слабое взаимодействие – ответственно за все виды β -распада ядер, за многие распады элементарных частиц и за все процессы взаимодействия нейтрино с веществом. Константа взаимодействия $\sim 10^{-14}$, радиус действия $\sim 10^{-13}$ см.

Гравитационное взаимодействие – универсальное, ему подвержены все без исключения элементарные частицы. Константа взаимодействия $\sim 10^{-39}$, радиус действия не ограничен ($r = \infty$).

Элементарные частицы обычно подразделяют на четыре класса.

Первый класс – фотоны (кванты электромагнитного поля, участвуют в электромагнитных взаимодействиях, но не обладают сильным и слабым взаимодействиями).

Второй класс – лептоны. К их числу относятся частицы, не обладающие сильным взаимодействием: электроны (e^+ , e^-), мюоны (μ^+ , μ^-), тау-лептон (τ^+ , τ^-), электронные нейтрино ($\nu_e, \bar{\nu}_e$), мюонные нейтрино ($\nu_\mu, \bar{\nu}_\mu$), тау-нейтрино ($\nu_\tau, \bar{\nu}_\tau$). Все лептоны обладают слабым взаимодействием, а мюоны и электроны еще и электромагнитным взаимодействием.

Третий класс – мезоны, представляющие собой сильно взаимодействующие нестабильные частицы. Это π -мезоны или пионы

(π^+, π^-, π^0) , k -мезоны или каоны $(k^+, k^-, k^0, \tilde{k}^0)$ и эта-мезон (η). Мезоны обладают слабым, сильным и, если они заряжены, то и электромагнитным взаимодействием.

Четвертый класс – барионы. К их числу относятся нуклоны (p, n) и гипероны ($\Lambda, \Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-, \Theta^0, \Theta^-, \Omega^-$). Все барионы обладают сильным взаимодействием.

Методы регистрации элементарных частиц.

Элементарные частицы удается наблюдать благодаря тем следам, которые они оставляют при прохождении через вещество. Характер следов позволяет судить о знаке заряда частицы, ее энергии, импульсе.

Приборы, применяемые для регистрации частиц, делятся на две группы. Первую группу образуют устройства, которые регистрируют факт прохождения частицы и позволяют судить о ее энергии. К группе регистрирующих приборов относятся ионизационные камеры и газоразрядные счетчики, черенковские счетчики, сцинтилляционные счетчики и полупроводниковые счетчики. Вторую группу образуют так называемые трековые приборы, к которым относятся камеры Вильсона, диффузионные камеры, пузырьковые камеры, искровые камеры и эмульсионные камеры.