



ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
УПРАВЛЕНИЕ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ И ПОВЫШЕНИЯ
КВАЛИФИКАЦИИ

Кафедра «Физика»

Учебное пособие
по дисциплине
«Квантовая механика»

**«Основы квантовой
механики и ее
приложения»**

Авторы
Благин А.В.,
Попова И.Г.

Ростов-на-Дону, 2022

Аннотация

Пособие составлено с учетом требований государственных образовательных стандартов для технических направлений, изучающих курс квантовой механики в течение одного семестра. Главное внимание в Пособии уделено теоретическим основам современной квантовой физики.

Учебное пособие призвано помочь студенту освоить комплекс идей, лежащих в основе квантовой физики твердого тела, физики полупроводников и специальных дисциплин. Пособие состоит из 9 глав.

Авторы

д.ф.-м.н., профессор Благин А.В.,
старший преподаватель Попова И.Г.



Оглавление

ПРЕДИСЛОВИЕ	5
Глава 1. Основы квантовой механики (часть I)	6
1.1. Волновые свойства вещества. Гипотеза де Бройля.....	6
1.2 Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля (опыты Дэвиссона –Джермера, Тартаковского, Томсона, Фабриканта).....	8
1.3 Волновые свойства микрочастиц. Принцип неопределенности Гейзенберга	9
1.4 Уравнение Шредингера. Волновая функция и ее физический смысл.....	12
1.5 Вычислительный аппарат квантовой механики	17
1.6 Парадоксы квантовой механики. Многомировая интерпретация квантовой механики Х. Эверетта.....	25
Глава 2. Основы квантовой механики (часть II) (простейшие задачи квантовой механики).....	35
2.1 Решение уравнения Шредингера для свободной частицы ..	35
2.2 Виды потенциальных ям. Решение уравнения Шредингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Силовое поле. Центральное силовое поле	36
2.3 Потенциальный барьер. Туннельный эффект	48
2.4 Квантовый гармонический осциллятор.....	60
3. Квантово-размерные структуры. Физические основы нанотехнологии в электронике.....	69
3.1 Основные направления развития, проблемы и перспективы нанотехнологии	69
3.2 Инструменты нанотехнологии	71
3.3. Квантово-размерные полупроводниковые структуры: квантовые ямы, нити, точки.....	83
Глава 4. Атом водорода в квантовой механике. Периодическая таблица атомов Д.И. Менделеева	94
4.1 Модель атома Томпсона. Спектр атома водорода. Опыт по рассеянию α -частиц. Планетарная модель атома Резерфорда	94
4.2 Постулаты Бора и его полуклассическая теория. Опыт Франка и Герца	98
4.3 Атом водорода в квантовой механике. Квантовые числа как результат решения уравнения Э.Шредингера и уравнения П.Дирака. Правила отбора	104
4.4. Принцип Паули. Периодическая система элементов	

Д.И.Менделеева	109
Глава 5. Строение вещества	114
5.1 Химические связи и энергетические уровни в молекулах, строение молекул	114
5.2 Энергетические уровни в молекулах. Молекулярные спектры. Комбинационное рассеяние света	115
5.3 Рентгеновское излучение. Тормозной и характеристический рентгеновские спектры. Закон Мозли.....	117
Глава 6. Основы физики твердого тела (часть I)	119
6.1 Вырожденные и невырожденные коллективы частиц. Фазовое пространство и его квантование. Химический потенциал. Понятие о квантовых статистиках. Функции распределения Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака	119
6.2 Применение квантовых статистик к описанию системы частиц. Химпотенциал. Бозе-конденсация. Энергия Ферми	124
Глава 7. Основы физики твердого тела (часть II)	132
7.1 Теплоемкость твердых тел. Электронный газ в металлах. Понятие о квантовой теории электро- и теплопроводности металлов. Явление сверхпроводимости.....	132
7.2 Решение уравнения Э.Шредингера для твердого тела. Понятие о зонной теории твердых тел. Металлы, полупроводники и диэлектрики. Их электрические свойства .	138
Глава 8. Полупроводники, их свойства и применение... 151	151
8.1 Собственная и примесная проводимость полупроводников. Эффект Ганна	151
8.2 Контактные явления в металлах и полупроводниках. ВАХ $p-n$ -перехода. Пробой. Барьерная и диффузионная емкость $p-n$ -перехода. Частотные свойства $p-n$ -перехода. Полупроводниковые диоды, диоды Шоттки.....	155
8.3 Люминесценция твердых тел. Оптические и фотоэлектрические явления в полупроводниках.....	163
8.4 Эффект Зеебека, эффект Пельтье	166
Глава 9. Оптические свойства вещества	168
9.1 Отрицательное поглощение света и оптические квантовые генераторы или лазеры (LASER – Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Виды лазеров: газовые, жидкостные, твердотельные (рубиновые, полупроводниковые)	168
9.2 Жидкие кристаллы и их свойства	176

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящее пособие предназначено для студентов направления 28.03.02 “Наноинженерия” (профиль “Функциональные материалы”), может быть полезным также для тех направлений подготовки, которые изучают в том или ином объеме специальные главы физики. Пособие может быть использовано студентами также для самостоятельного изучения соответствующего материала, является базой для подготовки к экзаменам по квантовой механике. Выполнение курсовой работы по дисциплине предполагает владение изложенным в пособии материалом.

Основу пособия составляют современные представления о строении вещества – элементы квантовой механики, положения физики атомов и молекул, а также элементы физики твердого тела и физики полупроводников.

Достаточно подробно освещаются вопросы, связанные с приложениями квантовой механики, в частности, в электронном материаловедении. Авторы выражают надежду, что данное пособие будет способствовать более глубокому изучению студентами курса квантовой механики.

ГЛАВА 1. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ (ЧАСТЬ I)

1.1. Волновые свойства вещества. Гипотеза де Бройля

В физике начала XX века возник целый ряд задач, при решении которых пришлось рассматривать излучение как поток частиц энергии - особенности излучения абсолютно черного тела, фотоэффект, эффект Комптона, боровская полуклассическая полуквантовая теория атома.

Установлены энергия и импульс каждой такой частицы - фотона:

$$\begin{cases} E = \hbar\omega, \\ p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}. \end{cases} \quad (1.1)$$

Физика в своем развитии часто встречалась с границами применимости существующих теорий. При этом разрабатывались новые, более общие решения. «Более общие» в том смысле, что старая теория входила в новую как частный, ограниченный случай. Совсем по-другому сложились взаимоотношения волновой и квантовой оптики. Ни одна из них не стала частью другой. Остались задачи (дифракция, интерференция, поляризация электромагнитных волн), которые решаются в рамках только волновой теории излучения. С другой стороны, были обнаружены явления (фотоэффект, эффект Комптона, «ультрафиолетовая катастрофа» в теории теплового излучения Рэля-Джинса), которые объясняются только корпускулярной природой света. Как пошутил Уильям Брэгг, «сложилась ситуация, когда каждый физик вынужден по понедельникам, средам и пятницам считать свет состоящим из частиц, а в остальные дни - из волны».

Лишь при объяснении немногих явлений (прямолинейного распространения света, эффекта Доплера, давления света и ряда других) можно с равным успехом следовать как одной, так и другой теории.

Такая двойственность теории излучения — *корпускулярно-волновой дуализм света* привела молодого французского физика Луи Виктора де Бройля, потомка великой королевской династии Бурбонов, к мысли о глобальном характере этой двойственности.

Если волна – частица, то и материальная частица – волна.

Основы квантовой механики и ее приложения

Волна-частица обладает энергией и импульсом (1.1). Де Бройль назвал ее "фазовой волной". Вслед за Пьером-Луи де Мопертюи, капитаном драгун и одновременно оригинальным мыслителем, сформулировавшим принцип наименьшего действия ("если в природе происходит само по себе какое либо изменение, то необходимое для этого количество действия есть наименьшее из возможных"), и Гамильтоном, блестяще применившим этот принцип в механике, а также Ферма, провозгласившим *принцип наименьшего времени для путей световых лучей*, де Бройль ищет объяснение на основе и объединении указанных экстремальных принципов.

По де-Бройлю (1924) любая материальная частица обладает волновыми свойствами и может характеризоваться соответствующей частотой и длиной волны

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv}, \\ \omega = \frac{E}{\hbar}. \end{array} \right. \quad (1.2)$$

Главный постулат де Бройля означает, что каждая частица материи является местом и источником связанного с ней колебания. Если эта частица движется, то ее колебание представляется неподвижному наблюдателю в виде волны. Используя этот подход, де Бройль решил задачу о движении электрона в атоме и пришел к боровским квантовым орбитам (т.е. объяснил происхождение спектров). Эта новая концепция привела де Бройля к закону Планка для излучения черного тела. В последующих работах де Бройль показал, что новые принципы позволяют количественно объяснить эффект Доплера, отражение от движущегося зеркала, давление излучения, приводя к тем формулам, которые дает волновая теория.

В научном мире гипотеза де-Бройля о волновых свойствах материи была воспринята неоднозначно. В 1925 году Эйнштейн, рекомендуя Максу Борну познакомиться с диссертацией Луи де Бройля, сказал буквально следующее: «Прочтите ее! Хотя и кажется, что ее написал сумасшедший, но написана она солидно!»

В 1926 году эта необычная гипотеза получила свое первое экспериментальное подтверждение. А в 1929 году де Бройль стал лауреатом Нобелевской премии по физике.

1.2 Экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля (опыты Дэвиссона –Джермера, Тартаковского, Томсона, Фабриканта)

В 1923 году в одном из своих докладов Парижской Академии наук де-Бройль говорил о возможных путях экспериментальной проверки своей теории: «Поток электронов, проходя через узкую щель, должен был бы дать явление дифракции».

Однако первое подтверждение справедливости волновой механики было получено в опытах по интерференции электронов. Первый эксперимент осуществили в 1927 г. американские физики Клинтон Джозеф Дэвиссон (1881–1958) и Лерстер Джермер (1896–1971).

Пучок ускоренных электронов направлялся на монокристалл никеля. Одна из вершин этого кристалла сошлифована перпендикулярно к большой диагонали кристаллической ячейки. Отраженные электроны улавливались «цилиндром Фарадея», соединенным с гальванометром. Этот измерительный цилиндр мог перемещаться по дуге вокруг кристалла. Сам кристалл тоже мог поворачиваться относительно оси, совпадающей с направлением

падающего пучка электронов. Были воспроизведены с дополнениями условия опыта, поставленного Дэвиссоном еще в 1921 г, работавшим тогда в фирме “Белл телефон”– он еще тогда обнаружил закономерность в углах отклонений

электронов, отраженных от никелевой пластинки, но не смог найти подходящего объяснения.

Расстояние между атомными плоскостями монокристалла никеля – d было известно из рентгенографических исследований. Сила тока рассеянных электронов оказалась максимальной при определенном значении угла рассеяния θ . Длина волны, соответствующая этому интерференционному максимуму, оказалась равной $d \cos\theta = m \lambda \Rightarrow \lambda = 1.65 \text{ \AA}$. В то же время легко рассчитать длину волны де Бройля падающих электронов

$$\lambda = 2\pi\hbar / p = 2\pi\hbar / (mv) = 1.65 \text{ \AA}, \quad \text{где}$$

$v = \sqrt{2eU/m}$ — скорость электронов при ускоряющем напряжении $U = 54 \text{ В}$.

Совпадение этих длин волн и явилось первым подтверждением волновых свойств частиц – в данном случае электронов. Вскоре удалось наблюдать экспериментально и дифракцию электронов. Результат дифракции электронов на кристаллической решетке приведен на рисунке 1.1.

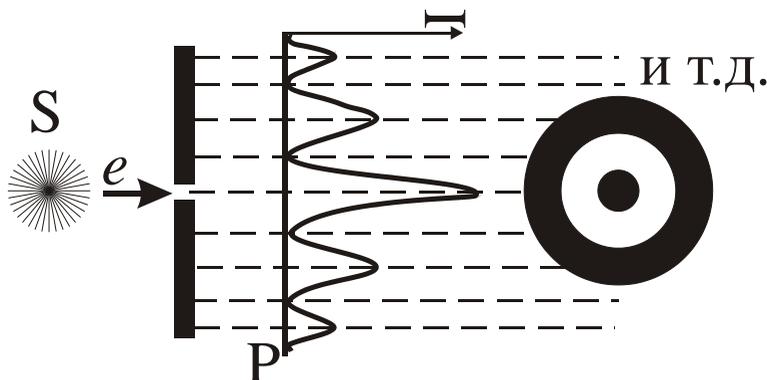


Рисунок 1.1 - Дифракция электронов на кристаллической решетке

Это явление исследовалось в лабораториях П.С. Тартаковского, Джорджа Паджета Томсона (1892–1975) (сына Дж.Дж.Томсона – “Джи-Джи”), Валентина Александровича Фабриканта (1907–1991) и др. ученых. Схемы их опытов очень близки.

Тонкий пучок ускоренных электронов пронизывал золотую фольгу (в опытах П.С. Тартаковского) и падал на фотопластинку.

1.3 Волновые свойства микрочастиц. Принцип неопределенности Гейзенберга

На рисунке 1.2 приведена схема мысленного эксперимента, поясняющего необычные свойства микрочастиц.

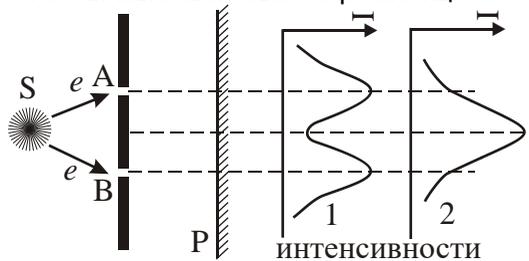


Рисунок 1.2 - Схема мысленного эксперимента, поясняющего дифракцию электронов

Основы квантовой механики и ее приложения

Здесь пучок ускоренных электронов падает на экран с двумя узкими щелями. Если закрыть одну щель, то электроны, прошедшие через другую, дадут определенное распределение интенсивности. Подобное же распределение, но несколько смещенное будет получено, если закрыть вторую щель и открыть первую. Теперь оставим открытыми обе щели. Здравый смысл подсказывает, что новое распределение частиц должно равняться сумме первых двух (см. рисунок 1.2, распределение 1). Однако опыт свидетельствует совсем о другом (см. рисунок 1.2, распределение 2). Распределение электронов отвечает интерференции двух когерентных волн! Таким образом, на движение каждого отдельного электрона оказывают влияние обе щели! Этот мысленный эксперимент подтверждает тот факт, что микрочастица-волна не просто «маленькое» материальное тело. Это объект, наделенный особыми свойствами, присущими элементам микромира. Так, например, нельзя указать траекторию микрочастицы, измерить одновременно ее скорость и координату...

Рассмотрим еще один пример: дифракцию микрочастиц на щели.

Поток микрочастиц подлетает к экрану со щелью, изображенному на рисунке 1.3. Пусть экран перпендикулярен потоку.

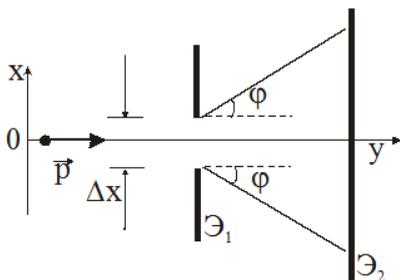


Рисунок 1.3 - Частица перед дифракционной решеткой

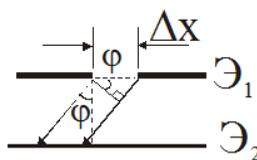


Рисунок 1.4 – Отклонение частицы

Достоверно известно, что перед щелью x -компонента импульса микрочастицы $p_x = 0$. Здесь скорость частиц перпендикулярна экрану, т.е. оси x . Погрешность этого сведения $\Delta p_x = 0$. Однако при этом совершенно не определена x -координата частицы.

Далее рассмотрим движение частицы-волны за щелью Δx . За щелью дифрагировавшие частицы будут отклонены в пределах угла $\pm\varphi$. Это максимальный угол, соответствующий дифракционному минимуму $\Delta x \sin \varphi = \lambda$. Отклонение на угол φ означает, что у микрочастицы появилась x -компонента импульса

$$\Delta p_x = p \sin \varphi = \frac{h}{\lambda} \sin \varphi.$$

Кроме того, теперь в щели мы

можем указать x -координату с погрешностью Δx . Тогда $\Delta p_x = 2\pi\hbar / \Delta x$ или

$$\Delta p \cdot \Delta x = 2\pi\hbar = h.$$

Последний результат обобщен Гейзенбергом и сформулирован как один из основных принципов квантовой механики: *произведение неопределенностей значений двух сопряженных переменных не может быть меньше постоянной Планка h*

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq h \quad (1.3)$$

Сопряженными величинами являются координаты и соответствующие проекции импульса, энергия и время. Произведение неопределенностей этих величин не может быть меньше по порядку величины постоянной Планка \hbar т.е.

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\geq h, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\geq h, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\geq h, \\ \Delta E \cdot \Delta t &\geq h. \end{aligned} \right\} \quad (1.4)$$

Последнее соотношение означает, что чем точнее мы хотели бы измерить энергию частицы, тем большее время займет это измерение.

1.4 Уравнение Шредингера. Волновая функция и ее физический смысл

В 1926 году швейцарский физик Эрвин Шредингер записал в явном виде уравнение для волн волновой механики. Шредингер знал о волнах де Бройля, и искал теорию для этих экстравагантных волн – волн вещества. Трудно сейчас воспроизвести работу его мысли. Но те, кто был современником Шредингера, говорят, что это было озарение – подобно яблоку Ньютона и ванне Архимеда. По одной из версий, Эрвин с супругой отдыхал на Цюрихском озере – “барашки” на поверхности напомнили ему уже известные в физике “волновые пакеты”. В те годы он однажды написал: “...Движущаяся частица есть не что иное, как пена на волновой радиации, образующей материю мира”.

Формально уравнение Шредингера (УШ) можно “вывести” следующим образом.

Согласно гипотезе, де Бройля, каждой движущейся микро-частице должна быть сопоставлена волна. Пусть свободной микро-частице, летящей вдоль оси x , соответствует плоская волна

$$\Psi = ae^{-i(\omega t - kx)} \quad (1.5)$$

Свяжем параметры волны с энергией и импульсом микро-частицы

$$E = \hbar\omega \Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad P = \hbar k \Rightarrow k = \frac{P}{\hbar}.$$

Теперь уравнение (1.5) можно записать иначе:

$$\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (1.6)$$

Продифференцируем это выражение один раз по времени и дважды – по координате:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \Rightarrow E = \frac{1}{\Psi} i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2 \Psi \Rightarrow p^2 = -\frac{1}{\Psi} \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (1.8)$$

В случае свободного движения нерелятивистской частицы, ее энергия и импульс связаны простым соотношением $E = p^2/2m$. Теперь, принимая во внимание это соотношение, легко связать уравнения (1.7) и (1.8)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.9)$$

Это и есть *волновое УШ* для одномерного движения свободной частицы.

В случае движения микрочастицы в силовом поле, потенциальная энергия U , полная энергия E и импульс p частицы связаны соотношением $p^2/2m = E - U$. Объединяя в этом выражении уравнения (1.7) и (1.8), получим:

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

Чаще “временную производную” функции выделяют:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.10)$$

Это *УШ для одномерного движения микрочастицы* в силовом поле. Для частицы, движущейся в произвольном направлении, запишем волновое уравнение в таком виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2 \Psi + U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (1.11)$$

Это уравнение получило название *нестационарного волнового*

УШ. Здесь $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta$ — оператор

Лапласа.

При движении микрочастицы в стационарном (неизменном во времени) силовом поле, решение УШ может быть представлено произведением двух множителей, один из которых является функцией только координат, а другой – только времени

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t}. \quad (1.12)$$

Используем это решение в дифференциальном уравнении (1.10)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t} \nabla^2 \psi + U \psi e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t} = i\hbar \left(-i \frac{E}{\hbar}\right) \psi e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t}. \quad (1.13)$$

Сократив на общий множитель $\exp\left[-i\left(E/\hbar\right)t\right]$, получим УШ для стационарных состояний

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

или

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (1.14)$$

Из указанных вариантов нестационарное уравнение (1.11) является универсальным, хотя оно не дает в явном виде силовой функции $U(\mathbf{r}, t)$ (эта функция приобретает смысл потенциальной энергии только в стационарных – консервативных с точки зрения классической механики полях). Важное отличие этого волнового уравнения от классических уравнений распространения различных волн состоит в присутствии мнимых коэффициентов в УШ. Эти мнимые коэффициенты принципиально неустранимы и в волновой Ψ -функции. Тем самым математически подтверждается тот факт, что волнам де Бройля, сопряженным с частицами, нельзя приписать «физического существования». Поэтому сам де Бройль называл эту волну «фиктивной», а Эйнштейн окрестил её «волной-призраком». Но вскоре за этими волнами закрепилось другое название: «волны вероятности».

Иными словами Борн и Гейзенберг предполагают существование частицы и связанной с ней непрерывной волны Ψ , но частица не имеет ни определённой скорости, ни определённой траектории. Речь может идти лишь о вероятности нахождения частицы в той или иной области пространства. Эту вероятность и определяет волна Ψ -функции – решение УШ.

Таким образом, вероятность dP обнаружить частицу в объёме dV можно записать в следующем виде

$$dP = A |\Psi|^2 dV = A \Psi^* \cdot \Psi dV, \quad (1.15)$$

где A – коэффициент пропорциональности.

Так как вероятность обнаружить частицу в пространстве равна единице («достоверное событие»), то $\int dP = A \int \Psi^* \cdot \Psi dV = 1$. Обычно выбирают ψ -функцию так, чтобы $A = 1$, т.е.

$$\int dP = \int \Psi^* \cdot \Psi dV = 1. \quad (1.16)$$

Этот интеграл представляет собой так называемое *условие нормировки*.

Волновая функция (Ψ), удовлетворяющая условию нормировки, называется *нормированной функцией*. Для нормированной Ψ -функции

$$dP = \Psi^* \cdot \Psi dV = |\Psi|^2 dV.$$

В случае *стационарного* силового поля

$$dP / dV = \Psi^* \cdot \Psi = e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t} \psi^* \cdot e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}\right)t} \psi = \psi^* \cdot \psi.$$

Это означает, что плотность вероятности обнаружить частицу в заданной точке стационарного поля, не меняется со временем:

$$dP / dV = \psi^* \cdot \psi = |\psi|^2 \neq f(t). \quad (1.17)$$

Ситуация необычная – впервые в нашем изложении возникла величина, сама по себе не имеющая физического смысла даже в рамках модели (вроде материальной точки, идеального газа, идеального теплового двигателя и т.п.): Ψ -функция есть математическая абстракция (“волна-призрак!”), и только квадрат ее модуля, определяемый (1.17), есть плотность вероятности нахождения частицы.

Необходимо подчеркнуть, что в волновой механике нет таких понятий классической механики как траектория, “точное положение” или “точная скорость” микрочастицы, Ψ -функция позволяет предсказать лишь вероятность обнаружения частицы в различных точках пространства.

Исходя из описанного выше смысла равенства (1.17), волновая функция (ВФ) обладает следующими свойствами:

а) ВФ должна быть *конечной*, так как вероятность не может быть бесконечной;

Основы квантовой механики и ее приложения

б) ВФ должна быть *однозначной*, так как вероятность не может быть многозначной;

в) ВФ и её производные должны быть *непрерывными* функциями, т.к. вероятность не может изменяться скачками а)–в) – так называемые *условия регулярности ВФ*);

г) т.к. вероятность нахождения частицы где-то в пространстве равна 1 (событие достоверное), то должно выполняться *условие нормировки* (1.16).

Отсюда также автоматически следует, что ВФ должна быть квадратично интегрируема.

Если же ВФ не нормирована на 1, то есть интеграл не равен 1, а равен N , то её нормируют, снабжая множителем $1/\sqrt{N}$. В общем случае интеграл должен быть конечен.

Например,

$$\int_0^a C^2 \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \int_0^a C^2 \left(\frac{1 - \cos \frac{2\pi x}{a}}{2} \right) dx = C^2 \left(\frac{x}{2} - \frac{a}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a} \right) =$$

$$= C^2 \left(\frac{a}{2} - 0 \right) - C^2 (0 - 0) = \frac{C^2 a}{2} = 1$$

$$\Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}}, \text{ а ВФ имеет вид}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right).$$

В следующей главе будет показано, что подобной функцией описывается состояние частицы в потенциальной яме, например, состояние электрона в тонкой металлической пленке.

В электродинамике мы встречались с принципом суперпозиции $\vec{E}_p = \sum_i \vec{E}_i, \vec{F} = \sum_i \vec{F}_i, \varphi = \sum_i \varphi_i$ и т.п. В кванто-

вой механике (КМ) принцип суперпозиции (наложения) состоит в следующем: если возможны состояния частицы (или системы частиц), описываемые ВФ $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$, то возможно и состояние, описываемое их линейной комбинацией:

$$\psi = \sum_i C_i \psi_i, \quad (1.18)$$

где C_i – комплексные, в общем случае, числа;

$$\sum_i |C_i|^2 = 1. \text{ Функции } \psi_i \text{ при этом называются } \textit{базисными}.$$

Например, если обратиться к опыту по дифракции электронов на двух щелях (рис. 1.2), то при закрытой щели A (B) плотность вероятности будет $W_A = W_1 = \psi_1 \psi_1^*$, ($W_B = W_2 = \psi_2 \psi_2^*$), при открытых обеих щелях $\psi = \psi_1 + \psi_2$ и этому состоянию соответствует новое распределение вероятностей: $W = \psi \psi^* = \psi_1 \psi_1^* + \psi_2 \psi_2^* + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 \Rightarrow W \neq W_1 + W_2$ (т.е. картина не является простым сложением “элементарных” картин, как следует из классической теории). *Складываются именно ВФ, а не вероятности – это важная особенность суперпозиции состояний в микромире.*

1.5 Вычислительный аппарат квантовой механики

КМ является разделом теоретической физики и для освоения ее на уровне применения к различным нестандартным задачам требуется изучение соответствующего отдельного курса. Студенты-физики изучают курс КМ в течении двух семестров. В нашем же изложении необходимо познакомиться с основными принципами этой удивительно изящной теории и ее математическим аппаратом. В КМ физические величины не могут вводиться непосредственно (если они, конечно, не заданы условием), для их вычисления вводят понятие *оператора*.

Под оператором понимается совокупность операций (умножение на число, на функцию, дифференцирование и т.д.), которые в определенной последовательности следует проделать с функцией $f(x)$. В результате получится другая функция – $g(x)$:

$$\hat{L}(f(x)) = g(x).$$

(Под x здесь понимается совокупность переменных, от которых зависит функция, для ВФ в общем случае это – координаты

и время; в стационарном случае от времени ВФ не зависит).

Если в результате действия оператора на функцию получается сама же эта функция, но с некоторым числовым множителем a , т.е. задано уравнение вида

$$\hat{A}f(x) = af(x)$$

и определён оператор \hat{A} (требуется найти a и $f(x)$), то удовлетворяющая всем требованиям для ВФ a – γ функция $f(x)$

называется *собственной функцией* оператора \hat{A} , принадлежащей его *собственному значению* a . Совокупность всех собственных значений называется *спектром оператора*, который может быть *дискретным, непрерывным или смешанным*.

Если частица находится в состоянии, описываемом функцией Ψ , и эта функция является собственной функцией некоторого оператора, то соответствующая этому оператору физическая величина имеет точное значение, а именно – собственное значение. Например, если

$$\hat{E}\Psi = E \cdot \Psi,$$

то энергия E имеет вполне определенное значение, неопределенность энергии $\Delta E=0$. Из соотношения неопределенностей следует, что время жизни в этом состоянии бесконечно велико.

В простейшем – одномерном – случае ВФ (1.6) можно записать в виде:

$$\Psi = ae^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right)} = ae^{-i(\omega t - kx)}, \quad (1.19)$$

где $\omega=2\pi\nu=E/\hbar=2\pi E/h$ – циклическая частота “волны вероятности”, а $k=p/\hbar=2\pi p/h=2\pi/\lambda$ – соответствующее волновое число. Продифференцируем формулу (1.19) по x ; производная будет частной, так как Ψ зависит не только от x , но и от t :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -a \frac{1}{i\hbar} p e^{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p}{\hbar}x\right)} = -\frac{p}{i\hbar} \Psi \quad \text{или}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p\Psi$$

(здесь p – это p_x , т.к. волна распространяется только вдоль оси x).

Основы квантовой механики и ее приложения

Рассмотрим последнее выражение: чтобы получить функцию Ψ , умноженную на величину импульса p (собственное значение оператора импульса, который мы пока не знаем!), необходимо саму функцию Ψ продифференцировать по x и умножить на $(-i\hbar)$, именно в таком порядке. Таким образом, мы получили выражение для оператора импульса по оси x :

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx},$$

аналогично, для операторов импульса по осям y и z получим:

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{d}{dy}, \text{ и } \hat{p}_z = -i\hbar \frac{d}{dz}.$$

Введя векторный оператор импульса $\hat{\vec{p}} = \vec{i}\hat{p}_x + \vec{j}\hat{p}_y + \vec{k}\hat{p}_z$, можно записать:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla,$$

где $\nabla = \vec{i} \frac{d}{dx} + \vec{j} \frac{d}{dy} + \vec{k} \frac{d}{dz}$ – оператор “набла”. Используя соотношения классической механики

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z,$$

можно получить оператор квадрата импульса

$$\begin{aligned} \hat{p}^2 &= (\hat{p}_x)^2 + (\hat{p}_y)^2 + (\hat{p}_z)^2 \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) = -\hbar^2 \Delta, \end{aligned}$$

где $\Delta = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}$ – оператор Лапласа.

Тогда оператор кинетической энергии:

$$\hat{E}_k = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta.$$

Оператор координаты представляет собой просто умножение на эту переменную:

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

Оператор радиус-вектора

$$\hat{\vec{r}} = \vec{i}\hat{x} + \vec{j}\hat{y} + \vec{k}\hat{z} = \vec{r}.$$

Поскольку полная механическая энергия частица состоит из энергии движения (кинетической) и энергии взаимодействия с другими частицами и полями (потенциальной, которая является функцией координат), то оператор полной энергии в общем случае будет иметь вид:

$$\hat{H} = \hat{E}_k + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z),$$

а конкретный вид оператора потенциальной энергии $\hat{U} = U(\vec{r}, t) = U(x, y, z, t)$ зависит от условий конкретной задачи. \hat{H} называют также оператором Гамильтона или гамильтонианом системы.

Что можно заключить из изложенного?

Пусть частица находится в некотором состоянии. Из УШ при задании определенных начальных и конечных условий можно получить ВФ Ψ , описывающую это состояние. Для некоторого оператора $\hat{\Phi}$ она может оказаться собственной. Это и будет наблюдаемое на опыте значение величины f , (координаты, проекции импульса на какую-либо ось, энергии и т.д.). Собственных функций и собственных значений может оказаться несколько: $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$, и f_1, f_2, \dots, f_n . Это будет означать, что в этом состоянии частица (или система) может иметь разные значения величины L . Однако найденная ВФ Ψ может оказаться и несобственной. В таком квантовом состоянии физическая величина f не имеет определенного значения. Это означает, что, согласно третьему постулату КМ, в этом случае результатом измерения физической величины f в системах квантового ансамбля будут только значения из спектра собственных значений оператора $\hat{\Phi}$. Причём в различ-

ных системах квантового ансамбля измерения будут давать разные значения f_1, f_2, \dots, f_n и т.д. При этом каждое из f_n в квантовом ансамбле будет обнаруживаться с определённой вероятностью W_n .

В процессе измерения квантовая система взаимодействует с измерительным прибором. В результате такого взаимодействия квантовая система, находящаяся в состоянии, описываемом ВФ Ψ , переходит с вероятностью W_n в состояние с ВФ Ψ_n . Такой переход называется *редукцией* или *коллапсом ВФ*.

В квантовых системах, в которых величина f не имеет определённого значения, имеет смысл находить среднее значение, т.е. математическое ожидание результатов измерений в серии из большого числа измерений (*теорема о среднем из теории вероятности*):

$$\langle f \rangle = \sum_n W_n f_n.$$

Обратимся к выражению (1.18), $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$, где коэффициенты C_n находятся по формуле $C_n = \int_{R^N} \Psi_n \Psi dV$.

Среднее значение величины f может быть определено как

$$\langle f \rangle = \sum_n W_n f_n = \sum_n |C_n|^2 f_n. \quad (1.20)$$

С учётом выражений для коэффициентов преобразуем последнее выражение:

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n C_n^* f_n = \sum_n C_n f_n \int_{R^N} \Psi_n \Psi^* dV = \sum_n C_n \int_{R^N} \Psi^* f_n \Psi_n dV.$$

По свойству собственных функций $f_n \Psi_n = \hat{\Phi} \Psi_n$, тогда

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n \int_{R^N} \Psi^* (\hat{\Phi} \Psi_n) dV = \int_{R^N} \Psi^* \left(\sum_n C_n \hat{\Phi} \Psi_n \right) dV.$$

С учётом свойств линейности оператора $\hat{\Phi}$ получаем:

$$\sum_n C_n \hat{\Phi} \Psi_n = \hat{\Phi} (\sum_n C_n \Psi_n) = \hat{\Phi} \Psi.$$

Окончательно для расчёта среднего значения физической величины f в квантовом состоянии системы, описываемом ВФ Ψ , получим формулу

$$\langle f \rangle = \int_{R^N} \Psi^* (\hat{\Phi} \Psi) dV \quad (1.21)$$

Это и подобные по структуре выражения можно записывать коротко, используя придуманный П.Дираком способ сокращенной записи: $\langle m | \hat{\Phi} | m \rangle$. Такие острые скобки называют *скобками Дирака*, или *брэкет-скобками* (от англ. слова bracket), причем $|m\rangle$ называют *бра*-вектором, а $\langle m|$ - *кет*-вектором.

Таким образом, КМ позволяет дать численную оценку потенциальных возможностей того или иного поведения квантового объекта. И хотя вероятность того или иного результата измерения в КМ относится к отдельному объекту, для экспериментального определения численного значения этой вероятности необходимо многократное повторение измерений в квантовом ансамбле одинаковых систем.

А. Эйнштейн писал: "Некоторые физики, в том числе и я сам, не могут поверить, что мы раз и навсегда должны отказаться от идеи прямого изображения физической реальности в пространстве и времени или что мы должны согласиться с мнением, будто явление в природе подобно игре случая..." Однако *внедрение случайности в жизнь Вселенной не порождает хаоса, а напротив, является необходимым условием самоорганизации.*

Важным в КМ является вопрос о возможности точного измерения в некоторой квантовой системе двух разных физических величин (например, импульса и координаты, энергии и интервалов времени, кинетической и потенциальной энергии и т.д.). Некоторая физическая величина считается измеренной точно в данной квантовой системе, если каждое её измерение в квантовом ансамбле одинаковых систем приводит к одному и тому же результату измерения. При этом предполагается, что эксперимент проведён идеально и приборные погрешности исключены.

Выше было показано, что физическая величина f может быть точно измерена только в такой системе, квантовые состоя-

ния которой описываются ВФ, являющейся одной из собственных функций соответствующего этой величине оператора $\hat{\Phi}$. При этом вовсе не обязательно, чтобы в этом квантовом состоянии была возможность так же точно измерить другую физическую величину b . Величины f и b могут быть одновременно точно измерены только в том случае, если соответствующие им операторы $\hat{\Phi}$ и \hat{B} имеют общую систему собственных функций.

Покажем, что если два оператора \hat{A} и \hat{B} имеют систему собственных функций, то между ними существуют некоторые *коммутационные соотношения* и результаты последовательности действия операторов на ВФ не зависят от порядка их применения. Действительно, пусть Ψ_n ($n = 1, 2, \dots$) являются собственными функциями оператора как \hat{A} , так и \hat{B} . Тогда

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi_n) = \hat{A}(b_n\Psi_n) = b_n(\hat{A}\Psi_n) = b_n a_n \Psi_n,$$

$$\hat{B}(\hat{A}\Psi_n) = \hat{B}(a_n\Psi_n) = a_n(\hat{B}\Psi_n) = a_n b_n \Psi_n,$$

a_n, b_n – собственные значения операторов \hat{A} и \hat{B} , соответствующие их общей собственной функции Ψ_n . Тогда

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi_n) = \hat{B}(\hat{A}\Psi_n). \quad (1.22)$$

Так как любая ВФ Ψ может быть представлена в виде линейной комбинации собственных функций $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$, то

в силу линейности квантово-механических операторов для любой ВФ должно выполняться коммутационное соотношение (Д4), которое в операторной форме имеет вид: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ или

$$\hat{C} = [\hat{A}\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad (1.23)$$

(*коммутатор операторов равен нулю*).

Таким образом, если две разные физические величины могут быть одновременно точно измерены, то соответствующие им операторы \hat{A} и \hat{B} должны быть коммутирующими. Справедливо

и обратное утверждение. К примеру, для операторов \hat{x} и \hat{p}_x имеем:

$$[\hat{x}\hat{p}_x]\Psi = \hat{x}(\hat{p}_x\Psi) - \hat{p}_x(\hat{x}\Psi) = x(-i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial x}) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = i\hbar\Psi \neq 0'$$

т.е. одновременно точно измерить координату x и проекцию импульса p_x частицы нельзя. Так математический аппарат КМ описывает факты, отраженные в соотношении неопределенностей Гейзенберга.

В заключение вопроса о соотношении неопределённости (9.4) сделаем важное замечание: величины Δx и Δp_x (Δy и Δp_y , Δz и Δp_z) в формуле (1.4) имеют смысл интервалов, в которые попадают значения координаты и проекции импульса при повторных многократных измерениях, проводимых над множеством независимых тождественных частиц, находящихся в одном и том же квантовом состоянии. Строго установить границы интервалов нельзя, они всегда условны.

В КМ математическим объектам и операциям над ними всегда соответствуют физические объекты и управляющие их движением законы. Советский физик А.В.Фок в своей книге «Начала квантовой механики» отмечал, что можно составить целый словарь для перевода КМ с математического языка на физический. В качестве примера приведём одну из страничек такого словаря, в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Соответствие математических операций физическим понятиям

Математика	<i>Физика</i>
Волновая функция Ψ	<i>Состояние квантовой частицы</i>
Квадрат модуля $ \Psi ^2 = \Psi\Psi^*$	<i>Плотность вероятности обнаружения частицы</i>
Условия нормировки $\int_{R^N} \Psi^* \Psi dV = 1$	<i>Достоверность наличия частицы в пространстве</i>
Линейный эрмитов оператор $\hat{\Phi}$	<i>Физическая величина f</i>

Собственная функция Ψ_n оператора \hat{F} , соответствующая собственному значению f_n	<i>Состояние квантовой частицы, в котором значение физической величины f равно f_n</i>
Квадрат модуля коэффициента в разложении ВФ Ψ в ряд по собственным функциям Ψ_n оператора \hat{F}	<i>Вероятность при измерении f получить значение f_n</i>
Интеграл $\int_{R^N} \Psi^* \hat{F} \Psi dV$	<i>Среднее значение (математическое ожидание) физической величины f в заданном квантовом состоянии</i>
Коммутативность операторов \hat{A} и \hat{B} : $\hat{A} \hat{B} = \hat{B} \hat{A}$	<i>Принципиальная возможность одновременно наблюдать и точно измерять физические величины a и b, являющиеся собственными значениями операторов \hat{A} и \hat{B} соответственно, соответствующие их общей функции Ψ_n</i>

1.6 Парадоксы квантовой механики. Многомировая интерпретация квантовой механики Х. Эверетта

Проблема измерения в квантовой механике приводит к ряду парадоксов – противоречий, с которыми наш “здравый смысл”, опирающийся на привычные рассуждения, не справляется!

Достаточно широко известен *парадокс шредингеровского кота*. В закрытом ящике находится кот, а рядом с ним в том же ящике – атом радиоактивного изотопа, счетчик продуктов распада и устройство, которое при срабатывании счетчика разбивает ампулу с ядом. Пока атом не распался, с котом все в порядке, но, когда атом распадается, под действием продуктов распада срабатывает счетчик, по его сигналу специальное устройство разбивает ампулу, и кот умирает от яда. Далее вступает в силу вероятностный характер квантовой механики. Неизвестно, когда атом распадется, в каждый данный момент имеется лишь определенная ве-

роятность распада. А точнее – в каждый данный момент атом находится в суперпозиции двух состояний: состояния, когда он еще не распался, и состояния, когда он распался.

И в результате возникает парадокс. Подходя к закрытому ящику, мы должны, согласно законам квантовой механики, считать, что система (атом+кот) находится в суперпозиции двух состояний: (нераспавшийся атом+живой кот) и (распавшийся атом+мертвый кот). Но, открыв ящик, мы, разумеется, никогда никакой суперпозиции не обнаружим, а увидим либо живого кота (и еще не распавшийся атом), либо мертвого кота (и уже распавшийся атом). Описание системы зависит, следовательно, от того, открыли мы ящик или еще не открыли. В этом и состоит парадокс. В более общих терминах, описание системы после измерения зависит от того, осознал ли наблюдатель результат измерения или нет. В случае шредингеровского кота измерением можно считать всю описанную процедуру, а результатом измерения – то, что наблюдатель видит, открыв ящик. При этом драматическая ситуация со смертью кота призвана лишь усилить психологическое воздействие на того, кто рассматривает эту ситуацию.

На самом деле парадоксальность возникает в любом квантовом измерении: пока результат измерения не осознан наблюдателем, этот наблюдатель описывает состояние системы как сосуществование (суперпозицию) двух или более альтернатив. Если же результат измерения уже осознан, наблюдатель описывает состояние как одну из альтернатив. Заметим, что происходящее нельзя объяснить лишь отсутствием у наблюдателя информации о результате измерения. Такое незнание результата измерения, которое сменяется знанием, если этот результат осознан, ничего удивительного собой не представляет и сплошь и рядом встречается и в классической физике, и в обыденной жизни. В квантовой механике все гораздо серьезнее, так как можно строго доказать, в том числе экспериментально, что перед измерением на самом деле сосуществуют все альтернативы, и пока наблюдатель не осознал, какой результат дало измерение, он обязан, следуя законам квантовой механики, описывать состояние системы как сосуществование (суперпозицию) всех альтернатив.

Парадоксальность происходящего при квантовом измерении "беспредела" еще более подчеркивается в "парадоксе друга Вигнера".

Юджин Поль Вигнер (1902–1979), выдающийся американский физик-теоретик в своей работе 1961 года рассмотрел ситуацию, в которой не он сам, а его друг проводит измерение некото-

рой квантовой системы, а потом сообщает ему результат измерения. Результат, в конечном счете, сводится к тому, что система находится в одном из двух состояний, Ψ_1 или Ψ_2 . Экспериментатор узнает о состоянии системы по вспышке света в измерительном устройстве. И в этом случае, как и в случае кота Шредингера, перед измерением система находится в состоянии, являющемся суперпозицией состояний Ψ_1 и Ψ_2 . А как описать состояние, в котором система находится после измерения? Оказывается, это опять зависит от сознания наблюдателя. Если экспериментатор еще не посмотрел на прибор, то он описывает состояние как суперпозицию Ψ_1 и Ψ_2 . Если уже посмотрел, то либо как Ψ_1 , либо как Ψ_2 , (в зависимости от того, что именно он увидел). Описание состояния системы зависит от того, осознал ли экспериментатор состояние системы или нет.

Это мы видели уже в парадоксе шредингеровского кота. Однако Вигнер вносит новый элемент за счет того, что его друг-экспериментатор передает информацию об измерении ему, Вигнеру. Пока Вигнер не получил этой информации, он описывает состояние системы как суперпозицию Ψ_1 и Ψ_2 . Получив информацию, описывает уже по-другому, либо как Ψ_1 , либо как Ψ_2 (в зависимости от того, каково содержание переданной информации). Значит, описание состояния системы Вигнером зависит от того, вошла ли в его сознание информация о результате измерения, переданная ему его другом экспериментатором. Парадоксальность ситуации подчеркивается следующим рассуждением. Вигнер говорит: "Если после окончания эксперимента я спрошу моего друга: Что ты чувствовал по поводу вспышки света перед тем, как я тебя спросил? — он ответит: Я уже сказал тебе, я видел (не видел) вспышку. Другими словами, вопрос о том, видел или не видел он вспышку, был уже решен в его уме прежде, чем я спросил его". Чтобы ясно увидеть, что здесь странного (парадоксального), переведем это на язык формул.

В статье Вигнера делался вывод, что живой наблюдатель играет особую роль в квантовой механике, нарушая каким-то образом линейный характер эволюции. Если в сознание наблюдателя входит информация о результате намерения, то описание состояния становится таким, которое не может получиться при эволюции, описываемой линейным оператором. Статья Вигнера была написана давно, еще в 1961 году, и ее аргументы кажутся на первый взгляд наивными. На самом деле, однако, они вскрывают глубокие и действительно весьма своеобразные черты квантовых измерений, которые хорошо понятны с чисто формальной, мате-

матической стороны, но плохо уживаются с нашей интуицией.

В лекции было показано, как описывается измерение в квантовой механике. Если быть кратким, то основой этого описания является, во-первых, вероятностное распределение по альтернативным результатам измерения и, во-вторых, постулат редукции, то есть переход от суперпозиции альтернатив к одной из этих альтернатив. Такое описание позволяет дать ответы на все вопросы, обычно задаваемые в физике, и предсказать (вероятностным образом) поведение любых реальных физических систем. Никакие парадоксы или концептуальные проблемы не мешают этим предсказаниям. Квантовая теория измерений хорошо работает.

Почему же возникают парадоксы, и с чем связано их возникновение? Нетрудно заметить, что парадоксы возникают каждый раз в том случае, когда упоминаются не только объективные аспекты измерения (состояние системы, состояние прибора), но и субъективный его аспект — что видит, или создает, наблюдатель. Это чрезвычайно важно. Хорошо работающая часть квантовой теории измерений — это та ее часть, которая остается после устранения субъективного элемента, сознания наблюдателя. Заметим, что после устранения наблюдателя нет никакой причины выделять один результат измерения (один член суперпозиции), а следует работать со всем множеством альтернативных результатов измерения, сопоставляя каждому из них его вероятность.

Проблема в том, что сознание наблюдателя в контексте к квантовой теории измерений — это то, что остается за пределами прибора. Более того, описание измерения существенно не изменится, если какие-то части прибора, отражающие результат измерения, описывать как части измеряемой системы. Это относится и к тем структурам в мозгу, которые отражают результаты измерения. Еще Гейзенберг заметил, что нельзя однозначно определить границу между измеряемой системой и прибором (точнее — между измеряемой системой и измеряющей средой, и которую следует включить и наблюдателя как материальную систему). Действительно, описание измерения принципиально не изменится, если включить в измеряемую систему и некоторые части прибора, состояние которых зависит от результата измерения. Можно, например, отнести к измеряемой системе чувствительный элемент прибора, непосредственно взаимодействующий с измеряемой системой, затем и регистрирующую часть прибора, его стрелку, потом фотоны, летящие от стрелки к глазу наблюдателя и несущие информацию о результате измерения, затем отнести к измеряе-

Основы квантовой механики и ее приложения

мой системе глаз наблюдателя, затем также нерп, несущий информацию от глаза к мозгу, затем зрительную часть коры головного мозга и т. д. Таким образом, граница между измеряемой системой и тем, что мы называем прибором, по существу произвольна.

Концепция Эверетта была предложена еще в 1957 году, сам Эверетт называл ее интерпретацией квантовой механики, основанной на понятии относительного состояния, однако позднее, после работ Уилера и Де-Витта, она стала называться *многомировой интерпретацией* (это название связано с тем, что интерпретация Эверетта допускает существование многих (фактически бесконечного числа) классических реальностей, которые можно наглядно представлять себе, как множество классических миров).

В концепции Эверетта (а точнее, в эквивалентной ей многомировой интерпретации) предполагается, что *различные компоненты суперпозиции соответствуют различным классическим реальностям, или классическим мирам*. Принимается, что эти реальности, или миры, совершенно равноправны, то есть ни один из них не более реален, чем остальные. В результате мы получаем картину многих миров в смысле Эверетта-Уилера-ДеВитта. А как же быть с сознанием? Ведь каждый наблюдатель видит один результат измерения, в его сознании, казалось бы, неизбежно происходит редукция, выбор одной компоненты суперпозиции из двух (или из многих). Не противоречит ли это концепции многих миров? Кажущееся противоречие разрешается очень просто: *сознание наблюдателя как бы расщепляется (разделяется)*, так что в каждом из классических миров этот наблюдатель видит то, что в этом мире происходит. Покажем это.

Обозначим вектором χ_0 начальное состояние наблюдателя, когда он еще не осознал результаты измерения (быть может, оно еще не закончилось, а быть может, он еще не посмотрел на приборы). Тогда состояние тройной системы (измеряемая система + прибор + наблюдатель) перед измерением описывается как $(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2\Psi_1)\Phi_0\chi_0$. Обозначим через χ_1 (соответственно χ_2) состояние наблюдателя в момент, когда он уже видит (осознает), что измерение дало результат 1 (соответственно 2). В этих обозначениях полная система (измеряемая система + прибор + наблюдатель) после измерения, но до осознания результата измерения находится в состоянии $(C_1\Psi_1\Phi_1 + C_2\Psi_2\Phi_2)\chi_0$, а после осознания – в состоянии $C_1\Psi_1\Phi_1\chi_1 + C_2\Psi_2\Phi_2\chi_2$.

В «эвереттовской» интерпретации этого выражения каждое слагаемое (компонента суперпозиции) соответствует своей клас-

Основы квантовой механики и ее приложения

сической реальности, или своему миру. В каждом из этих миров наблюдатель видит (осознает) то, что произошло именно в этом мире. В мире, обозначенном номером 1, наблюдатель находится в состоянии χ_1 . Это значит, что он осознал, что измерение дало результат 1, то есть что измеряемая система и прибор находятся в состоянии $\Psi_1\Phi_1$. Аналогично в мире с номером 2 тот же наблюдатель находится в состоянии χ_2 , то есть в его сознании картина происходящего соответствует состоянию $\Psi_2\Phi_2$ измеряемой системы и прибора.

Таким образом, *сознание наблюдателя расслаивается, разделяется, в соответствии с тем, как квантовый мир расслаивается на множество альтернативных классических миров*. В нашем примере альтернатив всего две, в общем случае альтернативных классических миров после измерения оказывается столько, сколько альтернативных результатов может дать измерение. Заметим, впрочем, что классических миров на самом деле может быть сколько угодно, даже бесконечное количество, и после измерения они лишь распадаются на классы (и этом случае тоже бесконечные), соответствующие альтернативным результатам измерения.

В обычной (копенгагенской) картине измерения происходит редукция состояния или, что тоже, выбор одного альтернативного результата измерения из всех возможных. Это можно назвать *выбором альтернативы*. Все альтернативы, кроме выбранной, после редукции исчезают. Переходя к эвереттовской интерпретации, мы видим, что редукции или выбора одной альтернативы (с отбрасыванием остальных) не происходит. Вместо этого происходит расщепление, или разделение, состояния квантового мира на альтернативные классические «реальности», или миры. Сознание наблюдателя воспринимает различные классические миры независимо друг от друга. Условно можно сказать, что сознание разделяется на компоненты, каждая из которых воспринимает лишь один классический мир. Субъективно наблюдатель воспринимает происходящее так, будто существует лишь один классический мир, именно тот, который он видит вокруг себя. Однако, согласно концепции Эверетта, на самом деле во всех альтернативных мирах имеются как бы «двойники» этого наблюдателя, ощущения которых дают каждому из них картину того мира, в котором «живет» именно он.

В интерпретации Эверетта возникает некоторая двойственность, довольно трудная для осмысления. Все альтернативы реализуются, и сознание наблюдателя разделяется между всеми альтернативами. В то же время индивидуальное сознание наблюда-

теля субъективно воспринимает происходящее как, будто существует лишь одна альтернатива, в которой он живет. Другими словами, сознание в целом разделяется между альтернативами, но индивидуальное сознание субъективно воспринимает лишь одну альтернативу. Каждая "компонента" сознания не знает, что существуют другие компоненты, и интерпретирует воспринимаемую ею картину как единственную реальность. На самом же деле существует множество "реальностей", и ни одна из них не более (и не менее) реальна, чем остальные. Очень важно понимать, что в любом эвереттовском мире все наблюдатели видят одно и то же, их наблюдения идеально согласованы друг с другом (если, конечно, не говорить о возможных чисто человеческих ошибках, а иметь в виду идеальных наблюдателей). Чтобы показать это, обобщим предыдущие формулы так, чтобы в них фигурировали состояния двух наблюдателей. Пусть первоначальное состояние измеряемой системы, прибора и двух наблюдателей имеет вид $(C_1\Psi_1+C_2\Psi_2)\Phi_0\chi_0^{(1)}\chi_0^{(2)}$. Тогда в силу линейности квантово-механической эволюции после измерения это состояние перейдет в состояние $C_1\Psi_1\Phi_1\chi_1^{(1)}\chi_1^{(2)}+C_2\Psi_2\Phi_2\chi_2^{(1)}\chi_2^{(2)}$. Корреляция, описываемая этим вектором, такова, что-либо оба наблюдателя находятся в состоянии, обозначенном номером 1 (то есть видят первый результат измерения), либо оба находятся в состоянии с номером 2 (то есть видят второй результат). Вектор состояния после измерения не может включать факторы $\chi_1^{(1)}\chi_2^{(2)}$ или $\chi_2^{(1)}\chi_1^{(2)}$, которые означали бы, что один наблюдатель видит результат наблюдения 1, а второй видит результат 2. Таким образом, несогласованность наблюдений различных наблюдателей в одном и том же эвереттовском мире появиться никак не может.

Такова вкратце концепция Эверетта. На первый взгляд она кажется и фантастической, и слишком сложной. Это, однако, не совсем так. Во-первых, концепция Эверетта логически вытекает из единственного и, казалось бы, вполне естественного предположения – что *линейность квантовой механики не нарушается* в процессе взаимодействия измеряемой системы с прибором и последующего воздействия прибора на наблюдателя. Во-вторых, вся картина кажется более фантастической, чем она есть на самом деле, когда, стремясь выразиться наглядно, говорят о многих классических мирах. На самом деле картина многих миров может вводить в заблуждение тех, кто знакомится с ней, не имея достаточного опыта в этом вопросе.

Стоит напомнить, что никаких "многих классических миров" на самом деле нет. *Есть только один мир, этот мир квантовый, и*

он находится в состоянии суперпозиции. Лишь каждая из компонент суперпозиции по отдельности соответствует тому, что наше сознание воспринимает как картину классического мира, и разным компонентам суперпозиции соответствуют разные картины. Каждый классический мир представляет собой лишь одну "классическую проекцию" квантового мира. Эти различные проекции возникают в сознании наблюдателя, которое "разделяет" квантовый мир. Сам квантовый мир существует как единое целое независимо от какого бы то ни было наблюдателя.

Если говорить «различные компоненты суперпозиции» и «различные классические миры», то исчезают многие недоразумения, бытующие в популярной литературе и в дискуссиях по данному вопросу. Например, картина многих миров создает иллюзию, что в момент измерения один классический мир превращается в несколько (или даже в бесконечное количество) миров. При этом иногда говорят и о чудовищном не сохранении энергии при таком "размножении миров". На самом деле, разумеется, никакого размножения миров в интерпретации Эверетта нет. И до измерения, и после него существует один-единственный вектор состояния, описывающий состояние квантового мира.

Что же происходит в момент измерения, а точнее, в период, когда происходит взаимодействие измеряемой системы с прибором? В этот период происходят специфические изменения в состоянии взаимодействующих физических систем, что отражается в изменении вектора состояния полной системы. Возникает *квантовая корреляция, или запутывание, между измеряемой системой и измеряющей средой, включая наблюдателя*. Для формального описания этого изменения, чтобы наглядно представить возникающие корреляции, мы уже первоначальный вектор состояния представляем в виде суперпозиции нескольких компонент, а потом показываем, как меняется при измерении (под влиянием взаимодействия) каждая из этих компонент. После перехода остаются те же самые системы, что существовали перед измерением (измеряемая система, прибор, наблюдатель, ...). Меняются лишь состояния этих систем. Изменения состояний участвующих во взаимодействии систем происходят согласованно, так что после взаимодействия имеет место квантовая корреляция этих систем, которой до взаимодействия не было.

Излишне упрощенным является не только представление о «ветвлении» мира, но и о том, что измерение происходит и определенный момент времени сразу во всех точках конечной области (в которой отлична от нуля волновая функция измеряемой систе-

мы). Такое представление несовместимо, например, со специальной теорией относительности, в которой одновременность событий в различных точках вообще нельзя определить. Все эти трудности возникают из-за идеализации, содержащейся в понятии мгновенного измерения. Они исчезают, если учесть, что реально взаимодействия, которые мы называем измерениями, происходят непрерывно. Проблема понимания лежит в том, что мы пока весьма туманно представляем себе, что такое наше сознание; как оно функционирует и т.д.

Концепция Эверетта не дает новых предсказаний в квантовой физике. Если мы принимаем гипотезу об отождествлении разделения альтернатив с сознанием, этот вывод не меняется. Дело в том, что для тех простых объектов, которыми занимается квантовая физика (электронов, атомов и пр.) действует универсальное вероятностное распределение по альтернативным результатам измерения, которое не зависит от сознания и ведет к обычным квантово-механическим предсказаниям. Таким образом, *в физике мы ничего, кроме логической полноты теории, не выигрываем*. Однако в психологии открываются новые возможности.

Действительно, в рамках данной концепции *сознание (психика) может обладать некоторыми чертами, которые в "классической" психологии ему не приписываются* (такими, как возможность выходить из классической реальности в квантовый мир (т. е. заглядывать в другие реальности) или даже влиять на выбор «своей» реальности. Эти гипотетические возможности требуют, разумеется, проверки. Однако вполне естественно попытаться отождествить эти "новые" возможности с необычными явлениями в области психологии, теории сознания и психологической практики, которые уже давно замечены, изучаются различными способами и даже эксплуатируются. С этой точки зрения, обсуждаемые «новые» черты сознания, возможно, давно известны. Если так, то некоторые подтверждения рассматриваемой нами концепции могут уже существовать без всяких дополнительных проверок. Но и в этом случае требуется тщательная и осторожная работа для анализа известных фактов и сопоставления их с тем, чего можно ожидать в рамках концепции Эверетта. Из современных концепций естествознания следует, что необычные способности сознания должны проявляться "на краю сознания", то есть тогда, когда сознание "почти выключено". Исходя из гипотезы отождествления сознания с разделением альтернатив, выключение сознания означает, что квантовый мир перестает разделяться на (изолированные друг от друга) классические аль-

тернативы, а вместо этого начинает восприниматься как целое. Возникает особое состояние сознания (возможно, это то же самое, что психологи называют «измененным состоянием сознания»), которое похоже на сон или “транс”.

Изложенная здесь концепция Эверетта приведена по данным книги известного физика, ведущего научного сотрудника Физического института РАН им. Лебедева Михаила Борисовича Менского “Человек и квантовый мир” (Фрязино, ВЕК-2, 2005).

Остается добавить несколько замечаний по поводу интерпретаций. Вопрос о том, что же именно наблюдает человек – объективную реальность, или же некий ее усеченный образ, доступный нашему сознанию – вопрос этот стар, как мир. Весьма оригинальные и глубокие ответы на него веками разрабатывались в религиозных доктринах и философских учениях. Особенно в этом преуспела мысль Востока. В индийской философии есть понятие «майя» – дословно, иллюзии. “Все что, есть – майя”, – говорится в ряде текстов. В учении древних латиноамериканских индейцев, которое пришло к нам в блестящих работах Карлоса Кастанеды, говорится о тоне – образе мира, доступном всем, и нагвале – истинной реальности, которую можно постичь, став на путь магии. В китайских и японских учениях – даосизме, дзэн-буддизме содержится призыв отказа от интерпретаций, целью же жизни провозглашается достижение так называемого просветления (сатори) – образ жизни, при котором все происходящее воспринимается непосредственно, без шаблонов (и формул!), навязываемых человеку обществом с первых осмысленных дней жизни. Конечно, речь идет о довольно сложных метафизических понятиях. Ближе всего по сути будет сказать так: необходимо воспринимать мир так, как его воспринимает ребенок – мы уже к 7 годам “успешно” разучиваемся его так воспринимать. Но вернемся к физике. Когда-нибудь, возможно, мысль о параллельных мирах из области фантастики перейдет в научное русло, и представляется, что квантовая механика и ее эвереттовская интерпретация сыграют здесь не последнюю роль. Заключить же настоящее Дополнение можно словами из “Краткого руководства к физике, для употребления в народных училищах Российской Империи, изданного по Высочайшему Повелению Царствующей Императрицы Екатерины Второй в Санкт-Петербурге, лета 1787-го”: *“Большая часть видимого нами строения мира кажется очам нашим совсем иначе, как она в самом деле находится. Несмотря на сие, рассматривание видимого разнообразия мира также имеет свою пользу и ведет нас к истине”.*

ГЛАВА 2. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ (ЧАСТЬ II)

(ПРОСТЕЙШИЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ)

2.1 Решение уравнения Шредингера для свободной частицы

Для свободной частицы, т.е. частицы вне силовых полей (связей), потенциальная энергия (взаимодействия) $U(x, y, z) = 0$, тогда уравнения Шредингера (УШ) (1.14) примет вид

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0.$$

Для одномерного случая

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0. \quad (2.1)$$

Общее решение имеет вид линейной комбинации частных решений: $\Psi = y = e^{-px}$, $y' = -pe^{-px}$, $y'' = p^2 e^{-px}$.

Из (2.1) $p^2 e^{-px} + k^2 e^{-px} = 0$, $\Rightarrow p^2 = -k^2$,

$p = -ik$, где $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$. Общее решение имеет вид:

$$\Psi(x) = A_1 e^{-i(\omega t - kx)} + A_2 e^{i(\omega t - kx)} = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}$$

Так как

$$E = \hbar^2 k^2 / (2m) = p_x^2 / (2m), \quad (2.2)$$

то в силу совпадения вида (2.2) с формулой классической механики для кинетической энергии можно сделать вывод о том, что энергия свободной частицы имеет сплошной спектр значений, так как волновое число k принимает любые значения.

2.2 Виды потенциальных ям. Решение уравнения Шредингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Силовое поле. Центральное силовое поле

Рассмотрим решение УШ для наиболее простой для анализа задачи о движении частицы в потенциальной яме (ПЯ) с бесконечно высокими (непроницаемыми) стенками. Такие ПЯ называют также *потенциальными ящиками*. Наиболее часто так называют трёхмерные ПЯ, где частица движется в ограниченном пространстве, т.е. её движение *финитно*.

Для простоты рассмотрим одномерный случай, а затем обобщим решение для трёхмерного случая. В данном случае, на рисунке 2.1 представлена зависимость потенциальной энергии от координаты $U(x)$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0; \\ 0, & 0 < x < a; \\ \infty, & x \geq a. \end{cases}$$

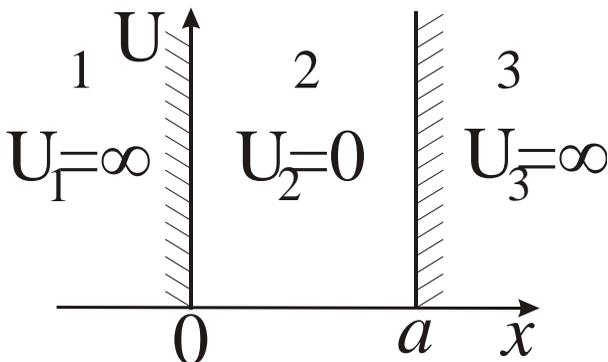


Рисунок 2.1 - Зависимость потенциальной энергии от координаты

Решаем УШ в виде (2.1) с условием $\Psi_1 = \Psi_3 = 0$ (частица не может быть в областях 1 и 3). Тогда имеем УШ (2.1) с общим решением в виде линейной комбинации линейно независимых функций $\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$, где

$k = \sqrt{(2mE)/\hbar^2}$. Налагая граничное условие $\Psi(x=0) = 0$, получаем $B = 0$. Для определения константы A воспользуемся условием нормировки:

$$\begin{aligned}
 \int_0^a |\Psi|^2 dx &= \int_0^a A^2 \sin^2(kx) dx = A^2 \int_0^a \frac{1 - \cos(2kx)}{2} dx = \left(\frac{A^2}{2} x - \frac{A^2 \sin 2kx}{4k} \right) \Big|_0^a = \\
 &= \left(\frac{A^2}{2} a - \frac{A^2 \sin 2ka}{4k} \right) = 1.
 \end{aligned}$$

Так как $\Psi(x=a) = 0$, то $A \sin kx = 0$. Считая $A \neq 0$ для получения нетривиального решения, имеем

$$\sin ka = 0, \quad \Rightarrow ka = \pm \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

(2.3)

$$\Rightarrow k = \frac{\pi n}{a}. \quad (2.4)$$

Тогда, возвращаясь к выполнению условия нормировки, можно записать $\frac{A^2}{2} a = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Искомая ВФ примет вид

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin kx = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x.$$

(2.5)

С учётом $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ и выражения (10.4) получим

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n^2}{a^2}, \text{ откуда}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2. \quad (2.6)$$

Т.е. энергия частицы в ПЯ квантуется, E_n называется уровнем энергии, а n – главным квантовым числом, E_1 – энергией основного (невозбуждённого) состояния частицы.

Записывая определение волнового числа $k = \frac{2\pi}{\lambda_B} = \frac{\pi n}{a}$,

получаем

$$\lambda_B = \frac{2a}{n},$$

т.е. на длине (ширине) ПЯ должно укладываться целое число полуволен де Бройля $\frac{\lambda_B}{2}$. Для ВФ в виде (2.5) имеем с усло-

вием $n \neq 0$ (из физического смысла $n = 0 \Rightarrow \Psi = 0$, т.е. частица в ПЯ отсутствует, это ограничение учитывается в (2.3)): частица не может находиться при $n=2$ (первое возбуждённое состояние) в точке $a/2$, а при $n=3$ – в точках $a/3$ и $2a/3$, и т. д. (вспомним, что квадрат модуля ВФ равен плотности вероятности нахождения частицы в заданной области или точке, что представлено на рисунках 2.2 и 2.3.

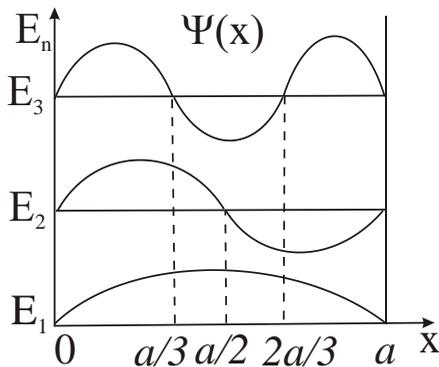


Рисунок 2.2 - Первые три волновые функции

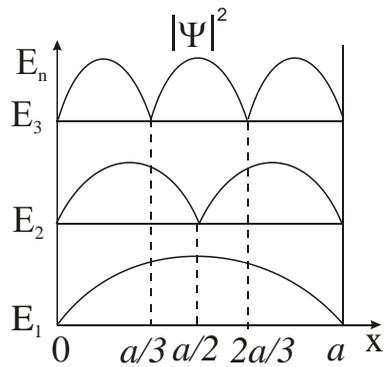


Рисунок 2.3 - Плотность вероятности для первых трех состояний

Записывая разность энергий

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n + 1),$$

оценим значение

$$\Delta E_n / E_n = \frac{2n + 1}{n^2}.$$

Видно, что с ростом n

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{2n + 1}{n^2} \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{2}{n} + \frac{1}{n^2} \right) = 0 \text{ и } \Delta E_n / E_n \rightarrow 0.$$

В этом заключается проявление *принципа соответствия Н.Бора* (1923 г.): при больших квантовых числах, т.е. при $n \rightarrow \infty$, КМ переходит в классическую.

Рассмотрим частицу в двумерной и трёхмерной ПЯ с бесконечно высокими стенками. В этом случае потенциальная энергия имеет вид

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & (x, y) \in \sigma \\ \infty, & (x, y) \notin \sigma, \end{cases}$$

(2.7, а)

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, (x, y, z) \in G, \\ \infty, (x, y, z) \notin G, \end{cases}$$

(2.7, б)

где $\sigma = \{(x, y) : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2\}$ – прямоугольная область на плоскости xOy (рис. 2.4, а),

$$G = \{(x, y, z) : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2, 0 < z < a_3\},$$

что представлено на рисунке 2.4, б – внутренняя область прямоугольного параллелепипеда.

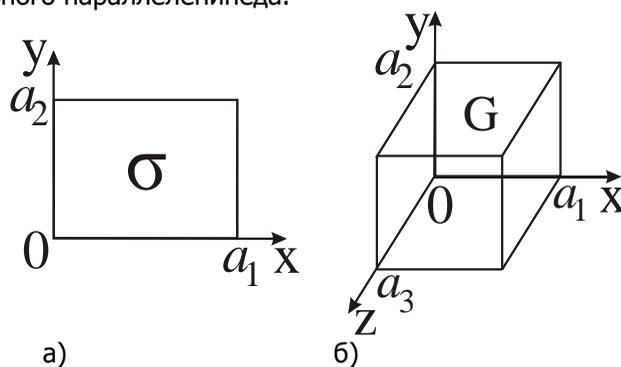


Рисунок 2.4 - Частица в двумерном и трехмерном потенциальных ящиках

Поскольку движение частицы в ПЯ вдоль оси Ox , Oy , Oz происходит независимо, то ВФ Ψ можно представить в виде произведения:

$$\Psi(x, y) = \Psi_1(x)\Psi_2(y), \quad (2.8, а)$$

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z). \quad (2.8, б)$$

Подставляя равенства (2.8) в УШ (2.1), с учётом (2.7), имеем

$$\Delta\Psi(x, y) + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(x, y) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Psi_2(y) \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + \Psi_1(x) \frac{d^2 \Psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \Psi_1(x) \Psi_2(y)$$

Разделив обе части на $\Psi_1(x) \Psi_2(y)$, получим

$$\frac{1}{\Psi_1(x)} \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{\Psi_2(y)} \frac{d^2 \Psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E,$$

$$\frac{1}{\Psi_1(x)} \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{\Psi_2(y)} \frac{d^2 \Psi_2(y)}{dy^2} + \frac{1}{\Psi_3(z)} \frac{d^2 \Psi_3(z)}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E$$

Каждое из слагаемых в левой части зависит только от одной переменной x , y , либо z . Так как их сумма равна константе, то каждое из слагаемых есть величина постоянная:

$$\frac{1}{\Psi_1(x)} \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_1,$$

$$\frac{1}{\Psi_2(y)} \frac{d^2 \Psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_2,$$

$$\frac{1}{\Psi_3(z)} \frac{d^2 \Psi_3(z)}{dz^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_3,$$

где E_1 , E_2 , E_3 – константы, имеющие размерность энергии E :

$$E = E_1 + E_2,$$

$$E = E_1 + E_2 + E_3.$$

Решая полученные одномерные уравнения аналогично рассмотренному перед ними одномерному случаю, с учётом выражений (2.5), (2.6) получим

$$\Psi_{1,n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1},$$

$$\Psi_{2,n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{a_2}} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2},$$

$$\Psi_{3,n_3}(z) = \sqrt{\frac{2}{a_3}} \sin \frac{\pi n_3 z}{a_3}.$$

С учётом формул (2.8а) и (2.8б)

$$\Psi_{n_1,n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{a_1 a_2}} \sin\left(\frac{\pi n_1 x}{a_1}\right) \sin\left(\frac{\pi n_2 y}{a_2}\right),$$

$$\Psi_{n_1,n_2,n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin\left(\frac{\pi n_1 x}{a_1}\right) \sin\left(\frac{\pi n_2 y}{a_2}\right) \sin\left(\frac{\pi n_3 z}{a_3}\right)$$

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2}\right)^2 \right], \quad (2.9, а)$$

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{a_3}\right)^2 \right]. \quad (2.9, б)$$

Рассмотрим движение частиц в квадратной ПЯ и кубической ПЯ. То есть $a = a_1 = a_2 (= a_3)$. Тогда уравнения (2.9) примут вид

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2), n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots,$$

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

Основы квантовой механики и ее приложения

Отсюда следует, что одному и тому же энергетическому уровню E_{n_1, n_2} (E_{n_1, n_2, n_3}), определённым квантовыми числами n_1, n_2 (n_3) при $n_1 \neq n_2$ ($\neq n_3$), соответствуют два (три) для основного (невозбуждённого $n_i = 1$) уровня энергии различных состояний частицы, описываемых ВФ Ψ_{n_1, n_2} и Ψ_{n_2, n_1} ($\Psi_{n_1, n_2, n_3}, \Psi_{n_2, n_1, n_3}, \Psi_{n_3, n_2, n_1}$). Энергетический уровень, которому соответствует не одно, а несколько состояний частицы, называется *вырожденным энергетическим уровнем*, а число соответствующих ему состояний – *кратностью или степенью вырождения энергетического уровня*. Энергетический уровень, которому соответствует одно состояние, называется *невырожденным*.

Для двумерной квадратной ПЯ кратность вырождения уровня при $n_1 \neq n_2$ равна 2, невырожденные уровни с $n_1 = n_2$. В случае трёхмерной кубической ПЯ кратность вырождения уровня с $n_1 \neq n_2 \neq n_3$ определяется числом перестановок $(n_1, n_2, n_3), (n_2, n_1, n_3), (n_3, n_1, n_2), (n_3, n_2, n_1)$, и т.д., что отражено в таблице 2.1.

Таблица 2.1 - Распределение состояний электронов по энергетическим уровням

№ уровня	Квантовые числа (n_1, n_2, n_3)	$\sum_{i=1}^3 n_i^2$
1	(1,1,1)	3
2	(1,1,2), (1,2,1), (2,1,1)	6
3	(1,2,2), (2,1,2), (2,2,1)	9
4	(1,1,3), (1,3,1), (3,1,1)	11
5	(2,2,2)	12
6	(1,2,3), (1,3,2), (2,1,3), (2,3,1), (3,1,2), (3,2,1)	14

Число перестановок из трёх чисел определяет кратность вырождения: $k_6 = 6$, $k_2 = k_3 = k_4 = 3$, $k_5 = 1$ – невырожденный уровень ($n_1 = n_2 = n_3$).

Рассмотрим *трёхмерный случай симметрии*. Потенциальная энергия частицы в сферической ПЯ в первом приближении имеет вид

$$U(r) = \begin{cases} 0, r < a, \\ \infty, r > a, \end{cases}$$

где r – расстояние от центра ядра. Тогда уравнение (10.1) примет вид

$$\Delta\Psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0, \quad 0 \leq r < a. \quad (2.10)$$

Поле – особая форма материи, связывающая частицы вещества или тела в единые системы и передающая с конечной скоростью воздействие тел друг на друга (т.н. "гипотеза близкодействия"). Полю присваивается роль передатчика взаимодействия (одно тело изменяет свойства окружающего его пространства, а другое тело это «чувствует»). Показанная А.Эйнштейном в его теории относительности взаимосвязь массы и энергии,

$E = mc^2$, позволяет утверждать вышесказанное. Попытки создать единую теорию поля, объясняющую все известные явления с единой точки зрения, пока не увенчались успехом.

Поле называется *силовым*, если в каждой точке рассматриваемого пространства определён вектор \vec{F} силы любой природы происхождения. Силовое поле называется *центральной* (гравитационное, электрическое, ядерных сил), если на тело (нуклон в ядре), помещённое в поле, действует сила, всегда направленная вдоль луча, соединяющего тело (точку) и центр силового поля (полюс), а величина силы зависит только от расстояния от тела до центра поля.

Так как силовое поле имеет сферическую симметрию, является *центральной*, то следует перейти в сферическую систему координат (ССК) и рассматривать ВФ Ψ как функцию от r, φ, Θ . Если учесть, что основное состояние частицы в яме является сферически симметричным, то есть не зависит от углов

Θ и φ , будем считать, что ВФ частицы зависит только от радиальной координаты r .

Тогда оператор Лапласа, действующий на функцию Ψ , записывается как

$$\Delta\Psi(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi(r)}{dr} \right) = \frac{d^2\Psi(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\Psi(r)}{dr},$$

а уравнение (2.10) примет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\Psi}{dr} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi = 0. \quad (2.11)$$

Искомое решение должно удовлетворять двум условиям $|\Psi(0)| < \infty$ и $\Psi(a) = 0$ (ограниченность ВФ и непрерывность ВФ с учётом непроницаемости стенок ПЯ). Будем искать ВФ в виде

$$\Psi(r) = \frac{U(r)}{r}. \quad (2.12)$$

Подставляя выражение (10.12) в уравнение (10.11), получим

$$\frac{d^2U}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} U = 0, \quad 0 \leq r \leq a,$$

с граничными условиями $U(0) = 0$ и $U(a) = 0$.

По аналогии с ВФ для частицы в одномерной бесконечно глубокой ПЯ получаем

$$U_n(r) = A \sin \frac{\pi n r}{a}, n = 1, 2, 3, \dots$$

Ненормированная ВФ

$$\Psi_n(r) = \frac{A}{r} \left(\sin \frac{\pi n r}{a} \right), n = 1, 2, 3, \dots,$$

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

Основы квантовой механики и ее приложения

Например, для нуклона в ядре при $n=1$, $m=1,67 \cdot 10^{-27}$ кг, $a=10^{-14}$ м $E_{min}=E_1=3,3 \cdot 10^{-13}$ Дж= $2,1 \cdot 10^6$ эВ= $2,1$ МэВ. Это значение энергии существенно превышает значение энергии электрона в атоме, что указывает на возможность выделения в ядерных процессах энергии, в миллион раз превышающей энергию химических реакций.

Вернёмся теперь к вопросу о расчёте средних значений параметров на примере частицы в одномерной прямоугольной ПЯ с бесконечно высокими стенками. Средние значения в квантовой механике выражаются интегралом

$$\langle f \rangle = \int_{R^N} \Psi^* (\hat{F} \Psi) dV. \quad (2.13)$$

Вычислим на основании выражения (2.13) средние значения координаты \bar{x} , импульса \bar{p} и энергии \bar{E} (для одномерного случая):

1)

$$\begin{aligned} \bar{x} = \langle x \rangle &= \int_0^a \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \right)^2 x dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a \frac{x(1 - \cos \frac{2\pi x}{a})}{2} dx = \frac{1}{a} \int_0^a x dx - \frac{1}{a} \int_0^a x \cos \frac{2\pi x}{a} dx = \\ &= \left| \begin{array}{l} U = x, \quad dU = dx \\ dV = \cos \frac{2\pi x}{a} dx, \quad V = \frac{a}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a} \end{array} \right| = \\ &= \frac{1}{a} \frac{a^2}{2} - \frac{1}{a} \left[\underbrace{\frac{xa}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a}}_{=0 \text{ (} \sin 2\pi = 0 \text{ и } \sin 0 = 0)} \Big|_0^a - \frac{a}{2\pi} \int_0^a \sin \frac{2\pi x}{a} dx \right] = \end{aligned}$$

$$= \frac{a}{2} - \frac{a}{4\pi^2 n^2} \cos \frac{2\pi n x}{a} \Big|_0^a = \frac{a}{2} - \frac{a}{4\pi^2 n^2} (1 - 1) = \frac{a}{2};$$

2)

$$\begin{aligned} \bar{E} = \langle E \rangle &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \right) \right) dx = \\ &= \frac{2}{a} \frac{\pi^2 n^2}{a^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{a^3 m} \int_0^a \left(\frac{1 - \cos \frac{2\pi n x}{a}}{2} \right) dx = \\ &= \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2a^3 m} \left(x - \frac{a}{2\pi n} \sin \frac{2\pi n x}{a} \right) \Big|_0^a = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2a^2 m}; \end{aligned}$$

3)

$$\begin{aligned} \bar{p} = \langle p \rangle &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \right) \right) dx = \\ &= -\frac{2}{a} i\hbar \frac{\pi n}{a} \int_0^a \underbrace{\sin \frac{\pi n x}{a} \cos \frac{\pi n x}{a}}_{\frac{1}{2} \sin 2\alpha} dx = -\frac{i\hbar \pi n}{a^2} \int_0^a \sin \frac{2\pi n x}{a} dx = \\ &= \frac{i\hbar \pi n}{a^2} \frac{a}{2\pi n} \cos \frac{2\pi n x}{a} \Big|_0^a = 0. \end{aligned}$$

Тогда уравнения (2.14), (2.15) можно записать в виде:

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}k^2\Psi_1 = 0, \quad (2.16)$$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}q^2\Psi_2 = 0. \quad (2.17)$$

Общее решение уравнения (2.16) в случае высокого ($E < U_0$) порога запишем в виде линейной комбинации линейно независимых функций – суперпозиции плоских волн де Бройля без множителя $e^{-i\omega t}$, так как рассматривается стационарная задача:

$$\Psi_1(x) = A_1e^{ikx} + B_1e^{-ikx},$$

где A_1 – падающая на порог волна, B_1 – отражённая от порога волна. Для уравнения (2.17)

$$\Psi_2(x) = A_2e^{qx} + B_1e^{-qx}.$$

В силу конечности ВФ Ψ_2 коэффициент $A_2 = 0$. В силу того, что порог U_0 имеет конечную высоту, ВФ Ψ на границе раздела областей 1 и 2 должна быть непрерывной и гладкой, т.е. иметь непрерывную производную. *Условия сшивки решений* для областей 1 и 2:

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) &= \Psi_2(0), & A_1 + B_1 &= B_2, \\ \Psi_1'(0) &= \Psi_2'(0), & \text{или} & \\ & & ikA_1 - ikB_1 &= -qB_2. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Напомним, что коэффициенты $|A_i|^2$ и $|B_i|^2$ связаны с плотностью вероятности событий. Например, $|B_1|^2$ связан с вероятностью отражения частицы от порога, $|A_1|^2$ – с вероятностью

стью падения частицы на порог, а $|B_2|^2$ – с вероятностью того, что частица может быть обнаружена в области 2 потенциального порога, являющейся с точки зрения КФ для неё запрещённой.

Плотность потока вероятности для частиц:

1) падающих на порог

$$j_{na\partial} = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2; \quad (2.19)$$

2) отражённых от порога

$$j_{omp} = \frac{\hbar k}{m} |B_1|^2; \quad (2.20)$$

3) прошедших в область порога 2:

$$j_{npou} = \frac{\hbar q}{m} |B_2|^2. \quad (2.21)$$

Тогда коэффициент отражения от порога (R от лат. *reflection*)

$$R = \frac{|j_{omp}|}{|j_{na\partial}|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2};$$

(2.22)

прохождения через порог (прозрачность порога D или P)

$$D = \frac{|j_{npou}|}{|j_{na\partial}|} = \frac{|B_2|^2}{|A_1|^2},$$

причём по закону сохранения числа частиц:

$$R + D = 1, \quad (2.23)$$

$$(|j_{na\partial}| = |j_{omp}| + |j_{npou}|).$$

Для качественного анализа без потери общности решения положив $A_1 = 1$, из системы (2.18) получим:

$$B_1 = \frac{k - iq}{k + iq}, B_2 = \frac{2k}{k + iq}. \quad (2.24)$$

Система уравнений (2.18) имеет решение при любых значениях k и q ; это означает, что частица обладает непрерывным энергетическим спектром. С учётом $A_1 = 1$ и (2.24) из (2.22) имеем:

$$R = \left| \frac{k - iq}{k + iq} \right|^2 \rightarrow 1.$$

С учётом $A_2 = 0$ и равенств (2.24)

$$\Psi_2(x) = \frac{2k}{k + iq} e^{-qx}. \quad (2.25)$$

Из выражения (2.25) видно, что $\Psi_2(x)$ отлична от нуля и уменьшается с возрастанием x по экспоненциальному закону, а это означает, что существует отличная от нуля вероятность пребывания частицы под порогом при $E < U_0$:

$$\begin{aligned} w_2(x) &= \frac{dD}{dx} = |\Psi(x)|^2 = \left| \frac{2k}{k + iq} \right|^2 \exp(-2qx) = \\ &= \frac{4k^2}{k^2 + q^2} \exp\left(-\underbrace{\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}x}_{\alpha}\right). \quad (2.26) \end{aligned}$$

Проводя расчёт согласно (2.26) для $U_0 - E = 1$ эВ = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж, для двух значений $x = 10^{-10}$ м и $x = 10^{-9}$ м, получим $\exp \alpha \approx 0,29$ и $\exp \alpha \approx 4,58 \cdot 10^{-8}$ соответственно. Это означает, что проникновение электрона в область высокого потенциального порога с заметной вероятностью возможно лишь на расстояния, сравнимые с размером атома.

Таким образом, хотя $R \rightarrow 1 (\approx 1)$, т.е. отражение является полным, оно не обязательно произойдёт на самом пороге (на границе раздела). С некоторой вероятностью частица может проникнуть в область 2, а затем выйти из неё.

В случае низкого ($E > U_0$) потенциального порога аналогично рассмотренному выше имеем:

$$\text{для области 1} \quad \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k^2\Psi_1 = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E,$$

$$\text{для области 2} \quad \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + q^2\Psi_2 = 0,$$

$$q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0).$$

Решениями уравнений являются функции:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx},$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}.$$

Поскольку отражённая от порога справа волна отсутствует (частицы падают на порог слева), то $B_2 = 0$. Условие непрерывности $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$, $\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0)$ можно записать как

$$A_1 + B_1 = A_2,$$

$$kA_1 - qB_1 = qA_2.$$

Полагая $A_1 = 1$, получаем

$$B_1 \frac{k - q}{k + q}, \quad A_2 = \frac{2k}{k + q}. \quad (2.27)$$

Откуда

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{k - q}{k + q} \right|^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}}.$$

Отсюда следует, что при $E > U_0$ существует отличная от нуля вероятность того, что частица отразится от низкого потенциального порога, т.е. произойдет *надбарьерное отражение* – чисто квантовый эффект.

Вместе с тем с учётом формул (2.21) и (2.27)

$$D = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{4kq}{(k + q)^2} = \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - U_0/E})^2}$$

$$\text{и } R + D = 1.$$

Рассмотрим ПБ простейшей формы для одномерного движения частицы (вдоль оси Ox). Потенциальная кривая описывается системой

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ U_0, & 0 < x < l, \\ 0, & x \geq l. \end{cases}$$

Запишем УШ для областей 1, 2, 3, представленных на рисунке 2.6:

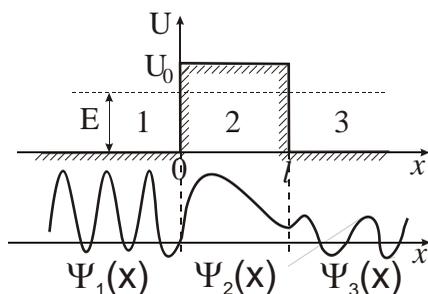


Рисунок 2.6 - Волновая функция в задаче с потенциальным барьером

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + k^2 \Psi_1 = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ (2) \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + q^2 \Psi_2 = 0, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0), \\ (3) \frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + k^2 \Psi_3 = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \end{array} \right.$$

Функции Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 представляют собой одно и то же решение в соответствующих интервалах изменения переменной X . Чтобы это решение было непрерывно вместе с первой производной необходимо выполнение граничных условий

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad \Psi_2(l) = \Psi_3(l), \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0), \quad \Psi_2'(l) = \Psi_3'(l). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Запишем общее решение уравнений системы:

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \\ (2) \Psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}, \\ (3) \Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}. \end{array} \right. \quad (2.29)$$

В областях 1 и 3 частица движется как свободная. Поэтому физический смысл выражений (слагаемых) $A_1 e^{ikx}$ и $A_3 e^{ikx}$ – волна, распространяющаяся вдоль оси Ox соответственно в 1 и 3-й области, а $B_1 e^{-ikx}$ – волна, отражённая от ПБ, движущаяся против оси Ox . Так как в 3-й области отражённых волн нет, то $B_3 = 0$.

Найдём коэффициенты A_1, B_1, B_2, A_2, A_3 . Для этого

решим совместно системы (2.33) и (2.29):

$$\Psi_1(0) = A_1 + B_1, \Psi_2(0) = A_2 + B_2, \quad \text{так как}$$

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \text{ то}$$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2; \quad (2.30)$$

$$\Psi_2(l) = A_2 e^{iq l} + B_2 e^{-iq l}, \Psi_3(l) = A_3 e^{ik l}, \quad \text{т.к.}$$

$$\Psi_2(l) = \Psi_3(l), \text{ то}$$

$$A_2 e^{iq l} + B_2 e^{-iq l} = A_3 e^{ik l}. \quad (2.31)$$

Найдём производные:

$$\Psi_1'(0) = (A_1 e^{ikx} ik + B_1 e^{-ikx} (-ik))_{x=0} = ikA_1 - ikB_1 = ik(A_1 - B_1),$$

$$\text{аналогично} \quad \Psi_2'(0) = iq(A_2 - B_2). \quad \text{Так как}$$

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0), \text{ то}$$

$$k(A_1 + B_1) = q(A_2 - B_2); \quad (2.32)$$

$$\Psi_2'(l) = (A_2 e^{iqx} iq + B_2 e^{-iqx} (-iq)),$$

$$\Psi_3'(l) = A_3 e^{ik l} ik, \text{ т.к. } \Psi_2'(l) = \Psi_3'(l), \text{ то}$$

$$iq(A_2 e^{iq l} - B_2 e^{-iq l}) = ikA_3 e^{ik l}. \quad (2.33)$$

Окончательно получаем систему из (2.30)–(2.33):

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ A_2 e^{iq l} + B_2 e^{-iq l} = A_3 e^{ik l}, \\ A_1 - B_1 = \frac{q}{k}(A_2 - B_2), \\ (A_2 e^{iq l} - B_2 e^{-iq l}) = \frac{k}{q} A_3 e^{ik l}. \end{array} \right. \quad (2.34)$$

Сложим почленно первое и третье уравнения системы (2.34):

Основы квантовой механики и ее приложения

$$2A_1 = A_2 + B_2 + \frac{q}{k}A_2 - \frac{q}{k}B_2 \Rightarrow 2A_1 = \left(1 + \frac{k}{q}\right)A_2 + \left(1 - \frac{q}{k}\right)B_2. \quad (2.35)$$

Сложим теперь почленно второе и четвёртое уравнения системы (2.34):

$$2A_2 e^{iq l} = \left(1 + \frac{k}{q}\right)A_3 e^{ikl} \Rightarrow A_2 = \frac{1}{2}A_3 e^{ikl} e^{-iq l} \left(1 + \frac{k}{q}\right). \quad (2.36)$$

Вычтем из второго четвёртое уравнение в системе (2.34):

$$2B_2 e^{-iq l} = \left(1 - \frac{k}{q}\right)A_3 e^{ikl} \Rightarrow B_2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k}{q}\right)A_3 e^{ikl} e^{iq l}. \quad (2.37)$$

Подставим выражения (2.36) и (2.37) в (2.35):

$$\begin{aligned} 2A_1 &= \left(1 + \frac{q}{k}\right)\frac{1}{2}A_3 e^{ikl} e^{-iq l} \left(1 + \frac{k}{q}\right) + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{q}{k}\right)\left(1 - \frac{k}{q}\right)A_3 e^{ikl} e^{iq l} = \\ &= \frac{1}{2}A_3 e^{ikl} \left[\left(1 + \frac{q}{k}\right)\left(1 + \frac{k}{q}\right)e^{-iq l} + \left(1 - \frac{q}{k}\right)\left(1 - \frac{k}{q}\right)e^{iq l} \right] = \\ &= \frac{1}{2}A_3 e^{ikl} \left[\left(\frac{k+q}{k}\right)\left(\frac{k+q}{q}\right)e^{-iq l} + \left(\frac{k-q}{k}\right)\left(\frac{q-k}{q}\right)e^{iq l} \right] \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\Rightarrow 4kqA_1 = A_3 e^{ikl} \left[(k+q)^2 e^{-iq l} - (k-q)^2 e^{iq l} \right];$$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4kq e^{-ikl}}{(k+q)^2 e^{-iq l} - (k-q)^2 e^{iq l}}. \quad (2.38)$$

Преобразуем знаменатель формулы (2.38) согласно формулам Эйлера

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi,$$

$$e^{-i\varphi} = \cos \varphi - i \sin \varphi \quad \text{или} \quad \cos \varphi = \frac{1}{2}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}),$$

$$\sin \varphi = \frac{1}{2i}(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) \quad (2.39)$$

Основы квантовой механики и ее приложения

После преобразований на основе (2.39) формула (2.38) примет вид:

$$(2.40) \quad \frac{A_3}{A_1} = \frac{2kqe^{ikl}}{2kq \cos ql - i(k+q)^2 \sin ql}$$

С учётом физического смысла формул (2.19), (2.20) и изменённого для данного случая равенства (2.21):

$$j_{\text{прош}} = \frac{\hbar k}{m} |A_3|^2$$

формулы для коэффициентов отражения и

прозрачности ПБ примут следующий вид:

$$R = \frac{|j_{\text{отп}}|}{|j_{\text{над}}|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}; \quad D = \frac{|j_{\text{прош}}|}{|j_{\text{над}}|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

с выполнением равенства (2.23).

Проведём анализ формулы (2.40):

1. Пусть $E > U_0$, тогда $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)}$ – число

действительное, отсюда $|A_3|^2 = A_3 A_3^* = e^{ikl} e^{-ikl}$ и

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k^2 q^2}{4k^2 q^2 \cos^2 ql + (k^2 + q^2)^2 \sin^2 ql}$$

Из равенства (2.23)

$$R = 1 - D = \frac{(k^2 - q^2)^2}{(k^2 + q^2)^2 + 4k^2 q^2 \text{ctg}^2 ql}$$

Получаем неожиданный с точки зрения классической механики результат: частица имеет не равную нулю вероятность отразиться от барьера, несмотря на то, что её энергия превышает высоту ПБ.

2. Пусть теперь $E < U_0$, тогда

$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)}$ – число мнимое. Обозначим в формуле

$$(2.36) \quad q = if, \text{ где } f = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)},$$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4kife^{-ikl}}{(k + if)^2 e^{fl} - (k - if)^2 e^{-fl}}. \quad (2.41)$$

Введём гиперболические функции (гиперболические синус и косинус):

$$shfl = \frac{1}{2}(e^{fl} - e^{-fl}),$$

$$chfl = \frac{1}{2}(e^{fl} + e^{-fl}).$$

Формулу (2.41) можно переписать в виде

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ikfe^{-ikl}}{(k^2 - f^2)shfl + 2ikfchfl},$$

тогда

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k^2 f^2}{(k^2 - f^2)sh^2 fl + 4k^2 f^2 ch^2 fl}. \quad (2.42)$$

Замечателен вывод из этой формулы: даже если $E < U_0$, то есть энергия частицы ниже пика барьера U_0 , то частица всё же может пройти через него.

На практике вместо громоздкой формулы (2.42) для приближённых оценок используют приближение при условии $e^{2fl} \gg 1$. Если это неравенство справедливо, то

$$shfl = chfl = \frac{1}{2}e^{fl} \text{ и формула (2.42) примет вид}$$

$$D = \frac{16k^2 f^2}{(k^2 + f^2)^2} e^{-2fl} = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} l \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

$$E < U_0. \quad (2.43)$$

Из формулы (2.43) видно, что вероятность прохождения частицы через барьер тем меньше, чем шире и выше барьер. Характерно, что частица выходит за пределы ПБ с той же энергией, с которой входит в него. Поэтому явление прохождения частицы через барьер называется *туннельным эффектом* (частица не взбирается на вершину барьера, она как бы проходит под ним через туннель). Туннельный эффект – чисто квантовое явление, которое можно объяснить только с учётом волновых свойств частиц. Он лежит в основе многих физических явлений, например, автоэлектронной или холодной эмиссии электронов из металла. Обобщим полученный для прямоугольного ПБ результат на случай ПБ произвольной формы, изображен на рисунке 2.7. Для этого представим ПБ в виде последовательности большого числа узких прямоугольных ПБ, расположенных один за другим. Будем считать, что барьер имеет достаточно плавную форму, то есть полагать, что его высота на расстоянии, сравнимом с длиной волны де Бройля, изменяется незначительно. Будем пренебрегать также надбарьерным отражением частицы.

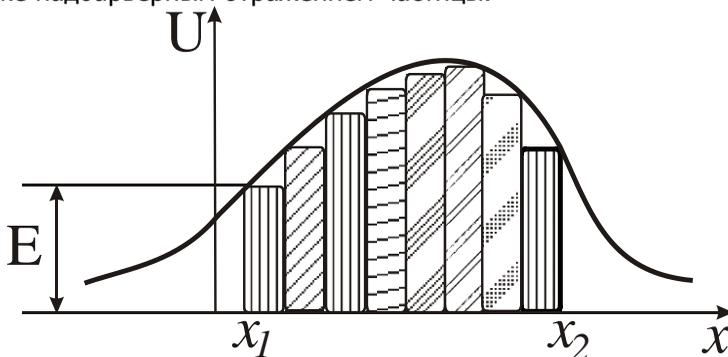


Рисунок 2.7 - Потенциальный барьер произвольной формы

Волна де Бройля, прошедшая через i -й прямоугольный барьер, представляет собой волну, падающую на $(i+1)$ -й ПБ и так далее.

Верность наступления цепочки взаимообусловленных событий (прохождения частицы через цепочку ПБ) равна произведе-

нию вероятностей (прохождения через каждый из барьеров):

$$D = \prod_i D_i \approx \prod \exp \left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(U(x_i) - E)} \right] =$$

$$= \exp \left[-\sum \frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(U(x_i) - E)} \right],$$

где Δx_i – ширина i -го барьера, $U(x_i)$ – его высота.

Переходя в пределе $\Delta x_i \rightarrow 0$ от суммирования к интегрированию, получаем

$$D = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right].$$

2.4 Квантовый гармонический осциллятор

Линейным гармоническим осциллятором (ЛГО) называется модель системы, в которой происходят гармонические колебания, причем, с малыми по сравнению с размерами системы, амплитудами. То есть, возмущения, приводящие к таким колебаниям, также должны быть малы.

Маятник – простейший пример ЛГО. Сила, возникающая в системе с маятником при его возмущении и возвращающая его в положение равновесия, называется квазиупругой.

Второй закон Ньютона для колеблющегося тела можно за-

писать в виде $ma = m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx$, откуда следует

$$\ddot{x} + \frac{k}{m} x = 0 \quad \text{или} \quad \ddot{x} + \omega^2 x = 0.$$

Это дифференциальное уравнение свободных незатухающих гармонических колебаний. Общее его решение имеет вид:

$$x(t) = A \cos(\omega t + \varphi_0). \quad (2.44)$$

Осциллятор при условии (2.44) называется ЛГО. Потенциальная энергия для гармонических колебаний, например, для пружинного маятника,

$$W_n = U = - \int_0^x F_x dx = \left[F = ma = m \frac{d^2 x}{dt^2} = -A\omega^2 \sin(\omega t + \varphi_0) = \omega^2 x \right] = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (2.45)$$

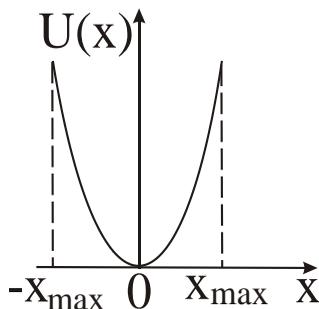


Рисунок 2.8 - Потенциальная энергия осциллятора

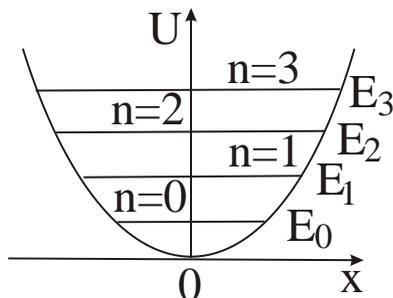


Рисунок 2.9 - Квантование энергии частицы в периодическом внешнем поле

Очевидно, что график функции (2.45) имеет вид параболы или, как часто говорят, мы имеем дело с ПЯ в форме параболы (параболической ПЯ, рис. 2.6). Амплитуда колебаний ЛГО зависит от его полной энергии.

Согласно КФ в точках $\pm x_{\max}$ полная энергия $E = U$ и ЛГО не может характеризоваться координатами $x < -x_{\max}$ и $x > +x_{\max}$.

В КМ вводится понятие *квантового гармонического осциллятора (КГО)*, для которого возможно попадание в область потенциального барьера и даже туннелирование, то есть существует отличная от нуля вероятность обнаружить частицу за пределами

области $-x_{\max} < x < +x_{\max}$. Примером КГО может служить частица, совершающая гармонические колебания в узле кристаллической решётки.

Рассмотрим одномерный случай КГО.

УШ будет иметь вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \underbrace{\frac{m\omega^2 x^2}{2}}_{U(x)} \right) \Psi = 0. \quad (2.46)$$

Упростим уравнение (2.46), введя замены

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (2.47)$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \Psi = 0. \quad (2.48)$$

В курсах математической физики показывают, что уравнение (2.48) имеет решения, если λ можно представить как целочисленный получим полином

$$\lambda = \lambda_n = 2n + 1, \quad (2.49)$$

отсюда следует с учётом замены (2.47):

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

где $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Даже при $n = 0$ $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$, т.е. минимальная

энергия КГО не равна нулю. Это подтверждается экспериментами по исследованию рассеяния света кристаллами с ростом температуры T . При $T \rightarrow 0$ К колебания (всякое движение, вспомним определение абсолютного нуля и термодинамической температуры из курса общей физики) должны исчезать и, следовательно,

должно прекращаться рассеяние света колеблющимися в узлах кристаллической решётки атомами (ионами). В действительности же $T \rightarrow 0 \text{ К}$ рассеяние не исчезает, а лишь стремится к неко-

торому пределу, обусловленному наличием $E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$ у

КГО.

Отметим, что уровни энергии КГО являются *эквидистантными*, что представлено на рисунке 2.8, расположены на равном расстоянии друг от друга), в отличие от случая прямоугольной ПЯ $\Delta E = \hbar\omega_0$.

Полиномы (2.50) обозначаются символами $H_n(\xi)$. Располаясь в них по своему усмотрению коэффициентами при низшей степени ξ , получаем либо a_0 (при n – чётном в полиноме содержатся только члены с чётными степенями, либо a_1 при n – нечётном). Обычно для удобства выбирают коэффициент при высшей степени равным 2^n , тогда полиномы совпадают с известными в математике *полиномами Чебышева–Эрмита* (иногда их называют просто полиномами Эрмита):

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n (e^{-\xi^2})}{d\xi^n}.$$

Тогда функция состояния (ВФ) КГО

$$\Psi_n = C_n e^{-\xi/2} H_n(\xi), \quad \xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

Из условия нормировки с использованием табличного интеграла

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi},$$

$$\frac{d^n H_n^u(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!,$$

получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^2 dx = C_n^2 \sqrt{\hbar/(m\omega)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) \frac{d^n(e^{-\xi^2})}{d\xi^n} d\xi = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} C_n^{-2},$$

$$C_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4} (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2},$$

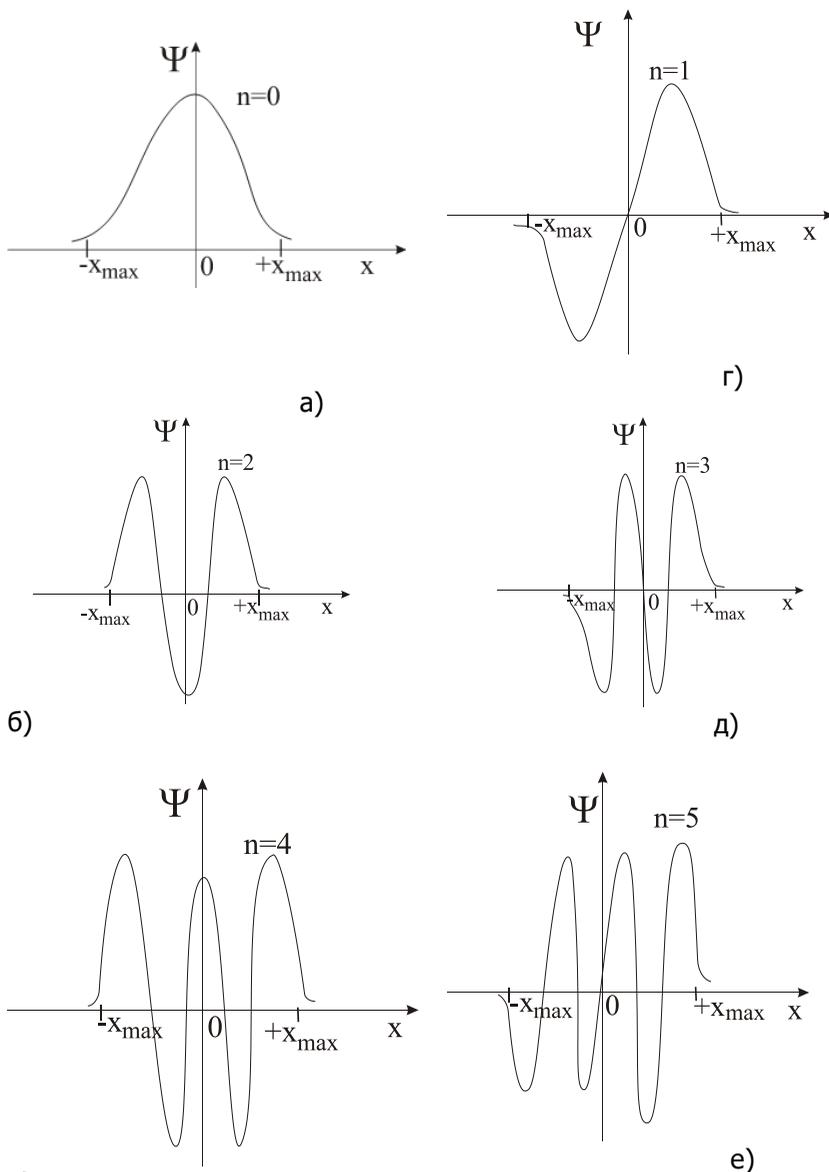
$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2}\right], \quad (2.51)$$

где $x_0 = [\hbar/m\omega]^{1/2},$

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \left(\frac{2x}{x_0}\right) \exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2}\right], \quad (2.52)$$

Графики ВФ для значений квантового числа n от 0 до 5 приведены на рис. 2.8. Отрезок $[-x_{\max}; +x_{\max}]$ определяет область, в которой совершал бы колебания классический осциллятор. Ширина же отрезка для КГО зависит от значения главного квантового числа n , так как $E=f(n)$, а, следовательно, и амплитуда колебаний КГО $A=f(n)$.

Основы квантовой механики и ее приложения



в) Рисунок 2.10 - Волновые функции ЛГО

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0}\sqrt{\pi}} \left(\frac{4x^2}{x_0} - 2 \right) \exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2}\right]. \quad (2.53)$$

Из рис. 2.10 и формул (2.51)–(2.53) следует, что ВФ КГО обладают определённой чётностью. Они являются чётными функциями координат x при чётных n и нечётными – при нечётных n . Значение n также определяет ещё и число точек пересечения n ВФ с осью Ox . Таким образом, при увеличении главного квантового числа n на 1 ВФ КГО меняет чётность и приобретает добавочную точку пересечения. Вне классической области $[-x_{\max}; +x_{\max}]$ ВФ Ψ_n отличны от нуля, т.е. существует отличная от нуля вероятность обнаружения частицы вне классической области.

При достаточно больших $n \rightarrow \infty$, например $n=10$, функция $|\Psi_n(x)|^2$ приближается к классической (для классического осциллятора), что удовлетворяет принципу соответствия Н.Бора (1923 г.). При $n = 10$ ВФ достигает максимумов вблизи т.н. точек поворота и резко спадает вне классической области движения (см. рис. 2.9).

Следует еще раз подчеркнуть, что модель гармонического осциллятора, и классического, и квантового, справедлива только при малых отклонениях колеблющейся системы (частица, маятника) от положения равновесия. В действительности потенциальная энергия $U(x)$ имеет более сложный по сравнению с выражением (2.45) вид. При возрастании амплитуды колебаний движение частицы становится все больше отличается от гармонических колебаний, т.е. всё более *ангармонично*. Соответствующий осциллятор называется ангармоническим.

Однако в первом приближении ряд реальных физических систем можно описывать моделью линейного КГО. Очевидно, уравнение квантования энергии трехмерного осциллятора несложно представить в виде суммы трех одномерных КГО:

$$E_n = \hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3) = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right),$$

Если рассмотреть звуковые колебания твердого тела как набор КГО, то получим, что при $T = 0$ К будут, как отмечалось выше, иметь место нулевые колебания. При представлении электромагнитных волн набором КГО можно “предсказать”, что в пустоте, даже в отсутствие частиц и квантов, также должны быть нулевые колебания. Эти колебания также были обнаружены.

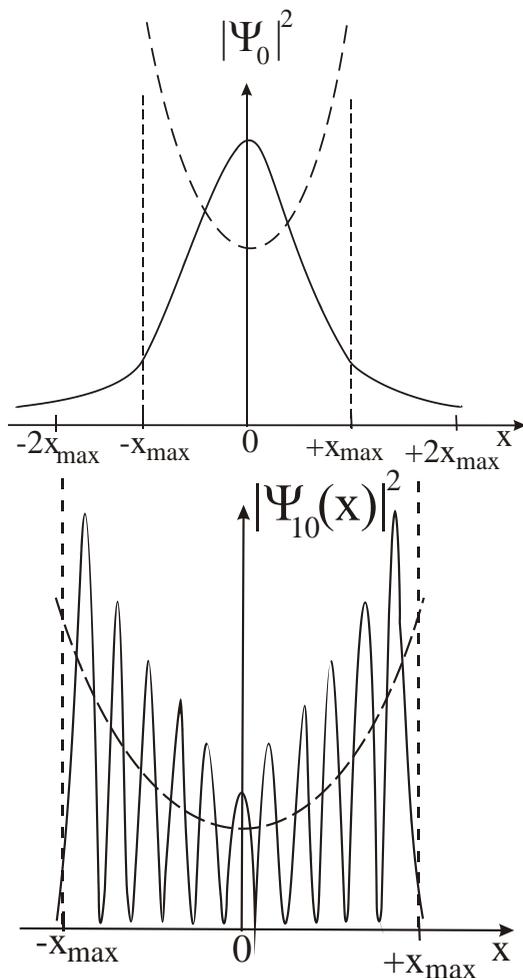


Рисунок 2.11 Волновые функции ЛГО для $n = 1$ и $n = 10$

Возможно, физика будущего сможет объяснить самое грандиозное и таинственное явление – Рождение Вселенной, используя представления о квантовых нулевых колебаниях для Изначального Вакуума – сейчас предполагают, что ранее 10^{-43} с известной истории Вселенной этот Вакуум пребывал в некоем экзотическом состоянии, называемом "точкой сингулярности". Этому состоянию приписывается отрицательная энергия, масса, давление – и положительная гравитация, то есть, гравитационное от-

талкивание.

Традиционно после рассмотрения стационарных задач КМ делается ряд обобщений и выводов:

1. Энергетический спектр частицы, находящейся в яме в связанном состоянии, является дискретным, т.е. энергия связанной частицы квантуется (дискретна), а свободной – меняется непрерывно.

2. Частица, находящаяся в основном состоянии, т.е. на самом низшем энергетическом уровне, обладает не равной нулю энергией даже при температуре, стремящейся к абсолютному нулю, что иллюстрирует невозможность абсолютного покоя и локализации частицы в точке пространства.

3. Плотность вероятности обнаружения частицы $|\Psi|^2$ имеет максимумы в области между классическими точками поворота и экспоненциально убывает вне классической области. Это означает, что с определённой вероятностью частица может находиться вне ямы (за исключением ям с непроницаемыми стенками), т.е. квантовые частицы могут проникать в области пространства, недоступные для классических частиц.

4. Координата и импульс (энергия и время) в связанных состояниях не определены. Это означает, что разделение полной энергии E на кинетическую и потенциальную невозможно.

3. КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНОТЕХНОЛОГИИ В ЭЛЕКТРОНИКЕ

3.1 Основные направления развития, проблемы и перспективы нанотехнологии

О возможностях нанотехнологии (создании наноструктур, нано – 10^{-9} , от греч. “нано” – карлик, т.е., характерные масштабы наноструктур – порядка 10^{-9} м) известно уже давно. Классикой считается лекция Нобелевского лауреата по физике Ричарда Фейнмана в 1959 г. с аллегорическим названием «Внизу полным-полно места» («There`s plenty of room at the bottom»). С появлением сканирующих туннельных микроскопов (1982 г.) и атомно-силовых микроскопов (1980-е гг.) исследователи обрели «глаза» и «пальцы», необходимые для создания наноструктур.

Очевидны перспективы применения нанотехнологий: наноразмерные переключатели, позволяющие увеличить память компьютеров в миллионы раз, минизонды, не повреждающие ткани организма, новая схема введения лекарств и даже генов в живые организмы, расшифровка генетических кодов, «операции внутри» – без вскрытия, создание полимерных, кристаллических и других материалов с наноструктурой, что позволяет значительно повысить их механические характеристики и снизить вес изделий, повышение качества печати с использованием наночастиц, т.д., в свою очередь, это вызовет переворот практически во всех областях жизни человека и в самом человеке.

Поскольку многие (большая часть) наноструктуры получаются в настоящее время методами самосборки (природные явления самоорганизации в сложных неравновесных системах), то актуальным является вопрос: до какой степени может быть развита техника самосборки для регулирования относительного расположения элементов наноразмерных устройств, учитывая, что при достаточно сложной последовательности операций количество «ошибок» может стать непреодолимо большим?

Очевидны поистине фантастические преимущества нанотехнологий, но вместе с тем, возникает и ряд вопросов о безопасности проводимых исследований (особенно в области нанобиотехнологий с генами животных и человека, вирусами и т.д.). Однозначный ответ на этот вопрос ученые пока не дали в силу отсутствия единого мнения в мировом ученом сообществе.

Многokратное увеличение быстродействия, уровня интегра-

ции и расширение функциональных возможностей в электронике, оптике, робототехнике, материаловедении, биологии, информатике и других областях науки и техники – это основные, уже *обозримые преимущества*, которые сулит использование нанотехнологий. Практически не останется ни одного раздела науки и техники, который не претерпит кардинальных изменений с развитием нанотехнологии. Поэтому развитие нанотехнологии за рубежом называют нанотехнологической революцией. Осознание стратегической важности работ привело к тому, что в разных странах на уровне правительств и крупнейших фирм созданы и успешно выполняются программы работ по нанотехнологиям. Изделия на основе нанотехнологии, созданные на основе оптимальной сборки атомов и молекул, позволяют реализовать предельно возможные характеристики, по сравнению с которыми остальные изделия будут неконкурентноспособными.

В Японии программа работ по нанотехнологии получила высший государственный приоритет "Огато". Данный проект спонсирует не только государство, но и дополнительно около 60 частных фирм. Кроме данного проекта, в Японии финансировалось около дюжины проектов, посвящённых различным аспектам нанотехнологии - квантовым волнам, флуктуациям в квантовых системах, направленных на исследование и разработки квантовых функциональных схем. Крупнейшими проектами являлись "Atom Craft project" и "Aono project". Внимание, уделяемое государством, было не случайным, ещё 10 лет назад в стране присуждались золотые медали за лучшие достижения в области нанотехнологии. Основные разработки проводились в центре перспективных технологий "Цукуба". В Европе более чем в 40 лабораториях проводятся нанотехнологические исследования и разработки, финансируемые как по государственным, так и по международным программам (программа НАТО по нанотехнологии).

В США отставание от Японии по объёму финансирования работ в области нанотехнологии стало предметом государственного обсуждения, в результате которого объём финансирования только фундаментальных исследований каждый год стал удваиваться. С целью форсирования работ именно на данном направлении в 2000 году по решению правительства США работы по нанотехнологии получили высший приоритет (*top priority*). В результате была создана программа Американской нанотехнологической инициативы, а при президенте организован специальный комитет, координирующий работы по нанотехнологии в 12 крупнейших отраслях промышленности и военных силах. Одной из

целей программы является создание на основе нанотехнологии вычислительных устройств с производительностью в миллион раз выше существующих процессоров Pentium. Кроме того, в отличие от финансирования работ в области фундаментальных исследований, объём финансирования работ по нанотехнологии в фирмах многократно выше. Например, только в фирме INTEL в прошлом году на разработки в области нанотехнологий было потрачено более 1 млрд. долл. В нашей стране фундаментальные научно-исследовательские работы по нанотехнологии проводятся по нескольким программам. К наиболее крупным из них относятся: программа "Физика наноструктур", руководимая академиком Ж.И. Алферовым, и "Перспективные технологии и устройства в микро и нанозлектронике", руководимая академиком К.А. Валиевым. Достижение уровня характеристических размеров элементов, соответствующих нанометровому диапазону, закономерно вытекает из хода исторического развития, определённого в различных научно-исследовательских работах (в частности из закона Мура). Считается, что с 2000 года началась эра гибридной нанозлектроники.

В настоящее время ежегодно проводится около десятка конференций, посвящённых различным аспектам нанотехнологии. Опубликовано несколько тысяч статей и даже несколько монографий, созданы специальные сайты в Интернете, происходит интенсивная подготовка к созданию нанозлектронных элементов и различных функциональных устройств от простейших до нанокomпьютеров.

В 2006 году Правительством Российской Федерации принята Федеральная целевая программа по Индустрии наносистем и материалов с необычно большим для постперестроечных лет бюджетом.

3.2 Инструменты нанотехнологии

В настоящее время быстро развивающаяся нанозлектроника использует широкий спектр методов получения наноструктур. Их обзор начнем с процессов, используемых в нанотехнологиях.

Нанотехнологические процессы.

Основой нанотехнологических процессов является проведение локальных атомно-молекулярных взаимодействий. В настоящее время наиболее распространены групповые технологии создания объектов нанометровых размеров с помощью осаждения и литографии.

Групповые технологии осаждения характеризуются особенностями, существенно ограничивающими возможности создания структур нанометровых размеров. Из-за одновременного осаждения на различные участки подложки возникают зёрна, дислокации, поры и другие дефекты. Применение методов *эпитаксии* (послойного наращивания кристаллических структур из жидкой или газовой фазы на подложке – кристаллической пластине, структурные характеристики которой, как правило, определяют и структуру наращиваемого материала) позволяет преодолеть данные недостатки, однако из-за высокой температуры эпитаксиальных процессов (необходимой для повышения поверхностной миграции) ликвидируется возможность локального осаждения. Локализация осаждаемого материала возможна в методе графоэпитаксии, однако его развитие сдерживается возможностями методов литографии.

Традиционно, основным направлением развития методов литографии, обеспечивающим повышение разрешающей способности, считалось применение свободно распространяющихся в пространстве частиц с меньшей длиной волны. Поэтому проводились разработки в направлении укорочения длины волны используемого излучения, базирующиеся на применении ультрафиолетового или синхротронного излучения, а также высокоэнергетичной электронной или даже ионной литографии.

Методы оптической литографии пока ограничены техническими возможностями фокусирования света - традиционными линзовыми системами, осуществляющими передачу излучения через открытое пространство в размеры, соизмеримые с длиной волны излучения.

Методы электронной и ионной литографии позволяют осуществить фокусировку воздействующего электронного потока в малые размеры. Однако высокая энергия фокусируемых электронов приводит к значительному разрушению используемых материалов, что ограничивает пространственную разрешающую способность метода. В тоже время, известен физический эффект, позволяющий получить пространственное ограничение потока излучения в размерах, меньших длины волны используемых частиц. Главная особенность эффекта заключается в наличии условий, запрещающих свободное распространение частиц через определённую область пространства. Этот эффект в ядерной физике первоначально получил название эффекта туннелирования. В оптике его называют эффектом нарушенного полного внутреннего отражения, а в СВЧ технике – эффектом запредельного волно-

вода.

Применение данных эффектов на вершинах зондов специальных конструкций позволило достичь высокой пространственной разрешающей способности без применения высокоэнергичных частиц и создать новые методы техники сканирующей зондовой микроскопии на их основе. Например, эффективная ширина потока туннелирующих электронов при энергии в доли эВ (электрон-вольт) не превышает 0,1-0,2 нм, а оптическое излучение металооптическими волноводами можно локализовать в области в десятки раз меньшей длины волны используемого излучения.

На основе техники сканирующей зондовой микроскопии стали создаваться методы нанотехнологии, использующие частицы с величинами энергий, определяемыми не энергией необходимой для их фокусировки, а оптимальной энергией стимуляции нанотехнологических процессов. Именно данное сочетание позволило достичь высокой разрешающей способности при формировании элементов нанометровых размеров.

Рассмотрим основные фазы нанотехнологических процессов. При этом целью повышения эффективности разработки нанотехнологий целесообразно выделить и проанализировать две важнейшие фазы атомно-молекулярных процессов, заключающиеся в фиксации и активации атомов. Наиболее распространенным типом фиксации является локализация нанообъектов (атомов, молекул, наночастиц) в неоднородном электрическом поле, создаваемом между вершиной зонда и поверхностью образца. За счёт дипольного момента и градиента электрического поля нанообъектам энергетически наиболее выгодно расположиться в области максимальной напряжённости электрического поля, то есть в промежутке зонд-подложка. Для повышения эффективности удержания целесообразно увеличивать величину градиента электрического поля, что достигается применением более острых зондов и увеличением напряжения между зондом и образцом. Для этого же целесообразно увеличивать величину градиента магнитного поля, что достигается применением более острых зондов с вершинами, изготавливаемых из материалов с максимально технически допустимой (по условиям применения в эксперименте) магнитной проницаемостью и увеличением напряжённости магнитного поля. При протекании электрического тока через нанообъект и одновременном действии магнитного поля (в том же направлении) возникает сила Лоренца, дополнительно локализуя движение нанообъекта.

Возможно, также локализовать атомы и молекулы с помо-

щью стоящих оптических волн. Для повышения величины барьера и степени локализации целесообразно увеличивать мощность и частоту применяемого излучения. Одним из возможных вариантов использования данного эффекта является использование зонда в качестве элемента метало - оптического волновода. Следует отметить, что при расположении нанообъектов между вершиной зонда и подложкой на них начинают влиять силы межатомного взаимодействия. С целью увеличения величины межатомных взаимодействий, кроме подбора соответствующего материала, целесообразно использовать зонды специальных конструкций, включая зонды из нанотрубок, увеличивающих размеры области взаимодействия.

Сравнение различных методов локализации показывает, что наиболее эффективным способом локализации является использование трёхмерного потенциального барьера, создаваемого на конце нанотрубки. Поэтому сочетание возможности инъекции частиц по нанотрубке и их локализация на конце является одним из наиболее перспективных направлений дальнейших разработок нанотехнологии.

Основной фазой нанотехнологических процессов, позволяющей изменить структуру объектов, является фаза активации. Возможности активационных процессов зависят, прежде всего, от величины энергии активации. Величины энергий активационных процессов находятся в диапазоне от долей до десятков эВ. Рассмотрим диапазон энергий активации, соизмеримых с величиной энергии тепловых колебаний ($\sim 0,25$ эВ). При таких энергиях активация может привести к увеличению эффекта поверхностной миграции, что позволяет преодолеть барьеры, локализирующие атомы при физической сорбции на поверхности. Кроме того, в ряде ситуаций данная величина энергии достаточна для начала процессов диссоциации молекул. При проведении нанотехнологических процессов необходимо даже создавать дополнительные условия диссоциации молекул, размещая их в областях с повышенной плотностью электронов или повышенной напряжённостью сил межатомного взаимодействия. Создание энергии активации в несколько эВ осуществляется приложением внешнего электрического поля, межатомного взаимодействия, теплового нагрева, рассеяния электронного потока и воздействия коллективных процессов. Диапазон энергий в десятые доли эВ соответствует дальнему инфракрасному диапазону. Основными процессами в данном диапазоне являются перемещение частиц и их тепловая активация. Перемещение частиц позволяет осуществить планарную

сборку вещества. Однако создаваемые структуры, вследствие невысоких энергий связи характеризуются невысокой стабильностью. В диапазоне энергий активации от нескольких эВ до десятка эВ (данный диапазон фактически является основным для большинства нанотехнологических процессов) имеют место разрыв и синтез органических молекул, ионизация и так далее. По величине энергии используемых квантов данный диапазон энергий соответствует оптическому. В данном диапазоне энергий возможна трёхмерная сборка ряда материалов с невысокой энергией связи. Создаваемые вещества характеризуются большей стабильностью (по сравнению с предыдущим методом). В диапазоне энергий более десятка эВ основными процессами являются ионизация практически всех материалов и испарение ионов. В данном диапазоне возможна трёхмерная сборка высокотемпературных материалов, характеризующихся наивысшей стабильностью. Важным вопросом является соотношение энергий воздействия и энергии, необходимой для проведения данного процесса.

Для проведения нанотехнологического процесса необходимо, чтобы энергия воздействия превышала пороговую энергию начала соответствующего процесса. Однако при проведении процесса с существенным превышением данных энергий разница энергий будет преобразовываться в движения, мешающие стабилизации результатов процесса. К ним относятся: разлёт частиц, стимуляция многокаскадных процессов, включая коллективные, ухудшающие локальность воздействия. Процессы, происходящие в результате данных методов активации, можно классифицировать по следующим основным типам.

Полевые процессы.

Поляризация атомов и молекул, приводящая к направленной ориентации, повышающая структурную упорядоченность вещества и тем самым повышающая вероятность соответствующих атомно-молекулярных процессов. В результате поляризации может образовываться состояние технологической среды, похожее на жидкокристаллическое. Стимулированная миграция атомов, молекул и наноструктур под действием градиента электрического поля. В результате стимулированной миграции возможно перемещение адсорбированных частиц на поверхности с целью формирования заданных структур. Диссоциация молекул и образование новых связей в сильных электрических полях и в областях с повышенной концентрацией электронов. В сильных электрических полях и в присутствии электронов, повышающих пространственную плотность электронов,

возможна стимуляция процессов диссоциации молекул и образования новых связей. Данный метод позволяет образовывать химические связи из адсорбированного вещества с подложкой, отличающиеся большей устойчивостью создаваемых наноструктур, по сравнению со структурами, удерживаемыми за счёт физической сорбции. Десорбция молекул и атомов с вершины зонда или соответствующего места подложки. Метод позволяет не только производить предварительную очистку вершины зонда и соответствующего места подложки, но и осаждать материалы с вершины зонда на подложку и наоборот. Ионизация атомов и молекул. Процесс значительно повышает скорость прохождения реакций.

Полевая деформация поверхности зонда и подложки. Процесс является следствием ряда процессов: создания кулоновского взаимодействия, рассеяния электронов и повышения скорости миграции.

Полевая эмиссия электронов и ионов. В сильных электрических полях на первом этапе возникает полевая эмиссия электронов, а при дальнейшем увеличении напряжённости поля до нескольких вольт на ангстрем начинается полевое испарение материала.

Кинетические процессы.

Рассеяние электронов. Процесс порождает возбуждение различных колебаний в молекуле, приводит к локальному разогреву, стимулирует поверхностную миграцию. Не всегда эффективность процесса достаточна для стимуляции нанотехнологических процессов, потому что масса электрона в тысячи раз меньше массы молекулы, на которой он рассеивается, и поэтому процесс передачи энергии происходит недостаточно эффективно. Рассеяние нейтральных частиц в большинстве процессов, стимулируемых вышеописанными методами, не используется или является вторичным эффектом. Однако в будущем, при специальном конструировании инжекторов нейтральных частиц, процесс мог бы быть более эффективным, чем процесс рассеяния электронов. Рассеяние заряженных частиц более эффективно по сравнению с рассеянием электронов, однако реализации данного режима противодействует обычно присутствующий поток электронов и достаточно малое время перезарядки.

Тепловое воздействие является наиболее эффективным способом стимулировать физико-химические процессы. Однако, несмотря на высокую скорость диссипации энергии, для обеспечения нанометровой пространственной разрешающей способности требуется осуществлять воздействия с пикосекундными дли-

тельностью.

Электромагнитные процессы.

Нерезонансные. При вводе излучения с частотой, не соответствующей пику поглощения, возможно использование процессов локализации, нагрева или охлаждения объектов, располагаемых в зазоре зонд-поверхность образца.

Резонансные в одном спектральном диапазоне. Применение излучения, соответствующего пику поглощения, позволяет повысить эффективность поглощения и соответствующего разделения молекул, а также запретить образование химических связей с энергией, равной энергии кванта вводимого излучения.

Резонансные в нескольких спектральных диапазонах. Введение излучения на нескольких частотах позволяет повысить эффективность управления технологическим процессом, сужая диапазон возможных разрешённых результатов путём увеличения числа запрещённых.

Спектрально синхронизованные. Прохождение во времени нанотехнологических процессов сопровождается сложным изменением во времени энергетических связей. При синхронизованной во времени накачке, амплитудной, частотной и фазовой модуляции возможно более эффективное управление ходом атомно-молекулярных процессов.

Пространственно-когерентные. Прохождение нанотехнологического процесса сопровождается изменением пространственного положения атомов и молекул. Введение излучения не только по времени, но и в пространстве когерентного с пространственным преобразованием положения атомов и молекул позволит обеспечить самое оптимальное управление ходом нанотехнологических процессов.

Межатомные взаимодействия. Потенциально данный вид взаимодействий является наиболее эффективным по величине энергий, по соотношению масс и так далее. Однако использование его требует создания специальных конструкций, изготовление которых в свою очередь также требует использования нанотехнологий. В дальнейшем возможно создание специализированных конструкций типа нанотрубок - транспортёров атомов в которых будут происходить несколько процессов - транспортировка, активация и так далее. Перечень классифицированных физических эффектов, используемых в нанотехнологических процессах, приведён на рис. 4. Соотношения между различными типами нанотехнологических процессов и их характеристиками приведены на рис. 5. Методы активации нанотехнологических процессов опре-

деляются в основном техническими возможностями нанотехнологических установок. К основным из них относятся создание между вершиной зонда и образцом:

- разности электрических потенциалов;
- механического воздействия;
- теплового воздействия (создание градиента температуры);
- оптического воздействия;
- ультразвукового воздействия;
- электромагнитного воздействия.

Предтечей зондовых технологий явился *сканирующий туннельный микроскоп*, действие которого основано на рассмотренном в предыдущей лекции туннельном эффекте.

Для вырывания электрона из металла требуется совершить работу (выхода). Холодная (автоэлектронная) эмиссия электронов из металла возникает при приложении сильного электрического поля у границы металл – среда. Потенциальная энергия электрона вблизи поверхности металла может быть представлена в виде

$$U(x) = U_0 - eEx,$$

где U_0 – глубина потенциальной ямы. Это равенство задаёт барьер треугольной формы.

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) был создан в 1982 г. сотрудниками исследовательского отдела фирмы IBM Г. Биннингом и Х. Рёерером. Поскольку СТМ явился первым техническим устройством, с помощью которого была осуществлена наглядная визуализация атомов и молекул, Бинниг и Рёерер были удостоены Нобелевской премии по физике 1986 г.

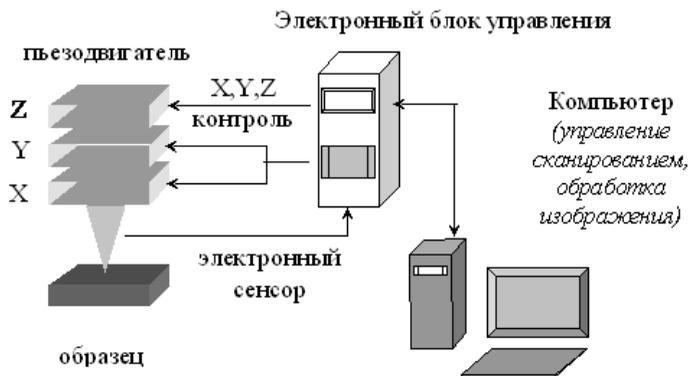


Рисунок 3.1 - Схема сканирующего зондового микроскопа

Если к поверхности проводящего образца на характерное (доли нм) расстояние подвести очень тонкую металлическую иглу, что изображено на рисунке 3.1), а затем приложить между образцом и иглой разность потенциалов $U \sim 0,1-1$ В, то в цепи потечёт туннельный ток, обусловленный туннелированием электронов через зазор: $I_T \sim 1-10$ нм ($I_T = Ne$).

Отсюда I_T уменьшается примерно на порядок при увеличении зазора (по экспоненте см. последнюю формулу для коэффициента прозрачности D прошлой темы с учётом того, что ширина зазора определяет ширину потенциального барьера).

Существуют два варианта режима работы СТМ: режим постоянной высоты и постоянного тока.

В первом случае информацию о рельефе поверхности с атомным пространственным разрешением получают через анализ изменения туннельного тока, а во втором случае – через анализ перемещений иглы в вертикальном направлении.

С помощью системы глубокого подвода и позиционирования иглу СТМ подводят на расстояние $\sim 0,1$ мкм. Дальнейшее перемещение иглы осуществляется с использованием специального сканирующего устройства на основе пьезоэлектрика – вещества, способного деформироваться (изменять свои размеры и форму) при приложении к нему электрического поля.

В качестве материала иглы обычно используют вольфрам, ванадий. Кончик иглы подвергают электрохимическому травлению для достижения радиуса иглы менее или равном $0,2$ мкм. Все операции СТМ управляются ЭВМ.

Например, в электронной микроскопии высокого разрешения энергия электронов достигает сотен кэВ, что приводит к образованию *радиационных дефектов*. Т.к. СТМ не содержит линз, т.е. нет аббераций, и не разрушает образец (энергия электронов при туннелировании меньше энергии химической связи (порядка нескольких эВ), то СТМ применяется для изготовления и исследования нанообъектов, вирусов, микромолекул.

С помощью СТМ из 35 атомов инертного ксенона (Xe) была собрана аббревиатура фирмы IBM. Сейчас существуют различные модификации СТМ, в частности атомно-силовой микроскоп, позволяющий изучать непроводящие образцы (вещества).

В зависимости от технологического режима, возможна также комбинация воздействий (в различных амплитудных и временных пропорциях). При проведении конкретных процессов не всегда удаётся использовать только один из физических эффектов. Реально используется их совокупность. В настоящее время нано-

технология находится в начале развития и поэтому ещё рано утверждать, что найдены самые оптимальные сочетания физических эффектов, используемые для проведения нанотехнологических процессов. Однако некоторые из сочетаний уже сейчас можно анализировать и использовать.

Нанотехнологические воздействия. В зависимости от уровня сложности и соответствующих технических возможностей нанотехнологических установок, в настоящее время применяются, а также могут быть использованы следующие нанотехнологические воздействия.

Полевое воздействие. Полевое воздействие является самым простым и поэтому самым распространённым. В результате полевого воздействия получены экспериментальные результаты по перемещению атомов и молекул, локальному электрохимическому травлению и осаждению из газовой и жидкой фаз. Основным недостатком метода являются технические проблемы активации нанотехнологических процессов при использовании изолирующих подложек.

Следует отметить, что для создания наноэлектронных элементов можно воспользоваться тем обстоятельством, что все элементы имеют электрическое подключение, в конечном счете, к внешним электродам. Поэтому формируя проводящие элементы от данных электродов, располагаемых на изолирующей подложке, возможно создание наноэлектронных функциональных элементов.

Другой способ преодоления существующего недостатка заключается в использовании нескольких зондов. При этом возможно пространственное разделение областей активации и области осаждения продуктов реакции. Данный способ проведения нанотехнологических процессов открывает возможность осуществлять их на подложках с любым типом проводимости.

Дальнейшее развитие многозондового метода проведения нанотехнологических процессов заключается в реализации мажоритарного способа активации, то есть заключающегося в инъекции носителей зарядов из нескольких зондов в один. При этом у данного зонда локально возрастает температура и тем самым повышается вероятность проведения локальной физико-химической реакции. Направленность процесса обеспечивается приложением напряжения между зондами соответствующей полярности.

Термополевое воздействие. Термополевое воздействие является сочетанием создания разницы температур между вершиной зонда и подложкой. Модификацией данного метода является приложение дополнительного напряжения между вершиной зонда и под-

ложкой (если подложка проводящая). Достоинством метода термополевой десорбции является возможность осаждения материалов любых типов с атомарной разрешающей способностью. Отличие метода заключается в необходимости достижения достаточно высоких температур и создания соответствующих градиентов.

Оптическое воздействие. Достоинствами метода являются:

- возможность резонансного поглощения излучения, приводящего к диссоциации молекулы;
- высокая степень локализации атомов и молекул в узле напряжённости электромагнитного поля;
- возможность работы с материалами подложки любых типов, включая диэлектрические.

Необходимо также познакомиться с наиболее распространенными в настоящее время методами получения так называемых квантово-размерных структур, о которых пойдет речь в заключительной части лекции – методах *молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) и газофазной эпитаксии с использованием металлоорганических соединений (МОС ГФЭ)*.

Процесс МПЭ – это процесс испарения и конденсации вещества в сверхвысоком вакууме ($P < 10^{-9}$ мм.рт.ст.). Проводят его в специальной камере, схематическое изображение которой показано на рис. 3.2. Наличие вакуумного шлюза позволяет менять подложки, сохраняя высокий вакуум. Для уменьшения давления остаточных газов вся свободная площадь камеры ограждается экранами, охлаждаемыми жидким азотом. Эффузионные (эффузия – медленное истечение газа через малое отверстие) испарительные ячейки выполняются из тугоплавкого материала, например, нитрида бора. После того как камера МПЭ откачана, экран охлажден жидким азотом, а испарители выведены на требуемую температуру, нагревается подложка. Для арсенида галлия ее температура должна составлять около 600°C , для кремния не ниже 850°C . Процесс роста слоев начинается при открытии основной заслонки и заслонок соответствующих испарителей. Сверхвысокий вакуум и малая скорость поступления атомов на растущую поверхность (примерно 10^{14} – 10^{15} атомов в секунду) приводят к эпитаксиальному росту пленок посредством практически монослойного заполнения растущей поверхности, обеспечивая исключительно точное управление профилями химического состава и легирования. В процессе МПЭ возможен непосредственный контроль как состава газовой фазы (масс-спектрометрия), так и параметров слоев: кристаллической структуры (методами дифракции быстрых или медленных электронов), химического состава

(оже-спектроскопия), толщины (эллипсометрия).

Измерительные датчики могут быть помещены непосредственно в высоковакуумную камеру установки.

Использование масок в ходе роста и “рисование” молекулярными пучками позволяют создать на поверхности подложки трехмерные, монолитно интегрированные структуры. Обладая неоспоримыми преимуществами, метод МПЭ имеет единственный, но весьма существенный недостаток – высокую стоимость, что вызывает поиск альтернативных методов.

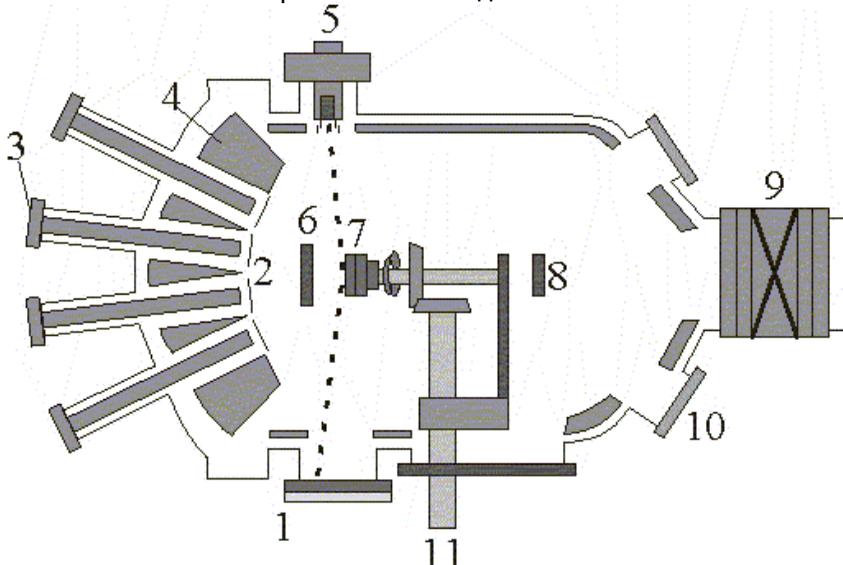


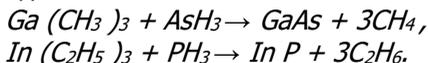
Рисунок 3.2 - Схематическое изображение ростовой камеры установки МПЭ:

1 – флуоресцентный экран дифрактометра, 2 – заслонки эффузионных испарительных ячеек, 3 – эффузионные испарители с веществом, 4 – экран с азотным охлаждением, 5 – электронная пушка дифрактометра, 6 – основная заслонка, 7 – вращающийся держатель подложки, 8 – ионизационный индикатор, 9 – шлюзовой клапан с вакуумным шлюзом для смены образцов, 10 – смотровое окно, 11 – ось двигателя для вращения подложки и питания нагревателя подложки. Пунктиром показан ход электронного луча дифрактометра

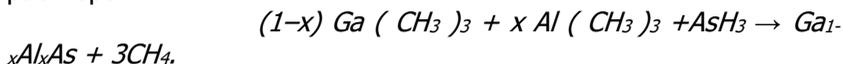
Одним из таких методов явился метод газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (ГФЭ МОС) или так называемая МОС-гидридная технология (особенно ее модифика-

ция при пониженных давлениях).

В этом случае исходные газообразные реагенты пиролитически (под действием высокой температуры) разлагаются у поверхности подложки, выделяя пленкообразующие компоненты, причем подложка является более нагретым телом, чем окружающая среда. При выращивании тонких слоев методом ГФЭ МОС контроль параметров пленок непосредственно в процессе синтеза неприменим, так как обычно используют достаточно агрессивные газовые среды. Процесс проводят в проточном вакуумном реакторе при давлении паров компонентов 0,1–10 мм.рт.ст. Снижение давления и увеличение скорости газового потока позволяют получать более однородные слои с контролем толщины до нескольких ангстрем. Исходными компонентами обычно служат метильные, этильные и изобутильные соединения металлов, а также гидриды некоторых элементов. В качестве примера можно привести химические реакции, протекающие у поверхности при получении тонких слоев полупроводников A^3B^5 :



Смешивая исходные компоненты в газовой фазе в определенных пропорциях, синтезируют эпитаксиальные пленки твердых растворов:



Добавляя в газовую фазу небольшие количества легколетучей примеси, получают легированные эпитаксиальные слои.

МОС-гидридная технология, успешно конкурируя с МПЭ своей простотой и производительностью, обладает несколько худшей воспроизводимостью и дает более расплывчатые профили изменения состава и легирования. Это обусловлено использованием как сравнительно высоких температур подложки, так и длительным временем синтеза.

3.3. Квантово-размерные полупроводниковые структуры: квантовые ямы, нити, точки

Часто при рассмотрении оптических явлений в полупроводниках предполагается, что объект объёмный и изотропный (кристалл, эпитаксиальный слой, и т. п.). *Объёмные, трёхмерные или 3D объекты* – объекты, фундаментальные физические свойства которых не зависят от их размеров в трёх направлениях. *Изотропный объект* – объект, свойства которого по всем направлениям одинаковы. Реальные объекты, например, кристаллы практи-

чески все *анизотропны*.

Объектами низкой размерности, низкоразмерными объектами или квантово-размерными объектами (системами, структурами) называют объекты, где движение носителей (частиц) ограничено по одной ($2D$), двум ($1D$) и трём ($0D$) (объекты – квантовые точки) координатам.

Под *квантово-размерными эффектами* (КРЭ) понимают зависимость физических свойств объекта или вещества от его геометрических размеров. Возможность появления таких эффектов определяется характерным физическим размером объекта. Для классических размерных эффектов роль характерного физического размера определяется длиной свободного пробега или диффузионной длиной, для КРЭ – дебройлевская длина волны электрона.

Удобным модельным объектом, позволяющим понять свойства квантово-размерных систем, является прямоугольная ПЯ. Мы уже рассматривали решения УШ для случая бесконечно глубокой ПЯ и ПЯ конечной глубины (часто в первом случае бывает удобно выбрать начало отсчёта не на границе ямы, а в её центре).

Практический интерес представляют не только одиночные структуры типа квантовых ям (КЯ), но и их набор. Если ПЯ отделены друг от друга достаточно широким потенциальным барьером (ПБ), так, что ВФ электронов не проникают из одной ямы в другую, то их взаимодействием можно пренебречь. Свойства структуры, состоящей из набора N одинаковых *невзаимодействующих ПЯ* будут просто аддитивно складываться. Такие структуры удобно использовать, например, для увеличения поглощательной способности или числа активных центров (рекомбинации и т.д.) в N раз.

Если же ширина ПБ и его высота позволяют электронам туннелировать из одной ПЯ в другую с достаточной эффективностью (расчёт исходя из вероятности и вида ψ -функции), то такая структура будет вести себя как единое целое и её необходимо рассматривать как систему взаимодействующих ПЯ. Простейшая структура состоит из двух одинаковых прямоугольных ПЯ конечной глубины $U_1 = U_2 = U$, разделенных ПБ шириной b и высотой V_0 . При сближении ПЯ и уменьшении толщины разделяющего их ПБ экспоненциальные хвосты ВФ проникают из одной ПЯ в другую – происходит их перемешивание. Это взаимодействие в рамках теории возмущений рассматривается как малое

возмущение. В случае одинаковых ПЯ ($\Psi_1 = \Psi_2$) это взаимодействие приводит к расщеплению энергетического уровня, например E_1 , на два состояния

$$E_1^{(S,a)} = E_1^{(0)} \pm V_{12}.$$

Нижнему состоянию (знак «-») соответствует симметричная (относительно центра структуры) ВФ, изображенная на рисунке 3.3, а) и это состояние называется симметричным, а верхнему (знак «+») – соответствует антисимметричная ВФ и это состояние называется антисимметричным.

Таким образом, в двойной КЯ, состоящей из двух одинаковых ПЯ, разделённых барьером b , происходит снятие вырождения по энергии путём расщепления уровней $n=1, 2, 3, \dots$ на симметричные ($1s, 2s, 3s, \dots$) и антисимметричные ($1a, 2a, 3a, \dots$) состояния. Величина расщепления тем сильнее, чем уже барьер и чем ближе уровень к *континууму* (к однородной, без включений протяженной среде).

Это связано с увеличением перекрытия ВФ как при уменьшении b , так и при увеличении n . Для двух связанных ПЯ с разными параметрами также будет наблюдаться взаимодействие между разными состояниями и их перекрытие из одной ПЯ в другую, изображенную на рисунке 3.3, б. Наиболее сильно это взаимодействие будет проявляться для резонансных состояний, близких по энергиям. Состояния, разделённые большим энергетическим интервалом, можно условно приписать одной или другой ПЯ, хотя при малой ширине барьера взаимодействие может быть настолько сильным, что применение теории возмущений становится недопустимым и всю систему необходимо рассматривать как единое целое.

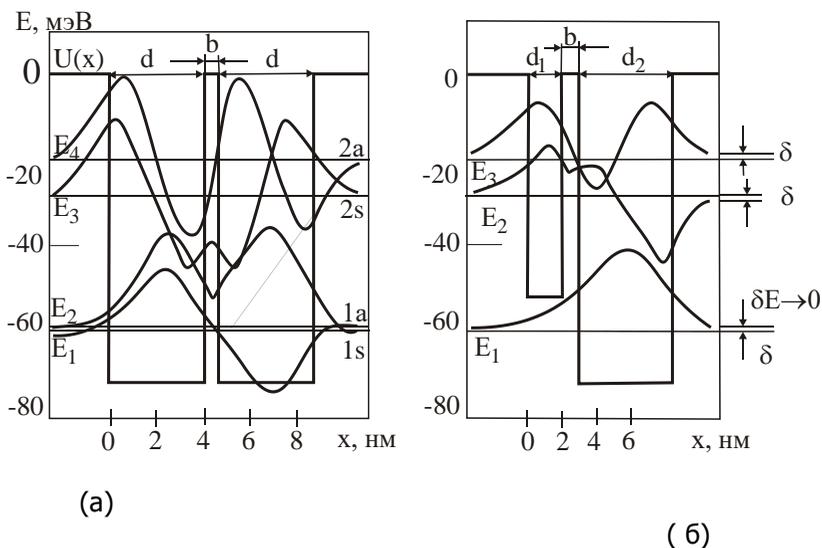


Рисунок 3.3 - Частица в системе двух ям

При увеличении числа N взаимодействующих ям каждый из уровней будет расщепляться на N состояний. При небольших значениях N каждое из этих состояний возможно различить, но при $N > 7$ они будут перекрываться, образуя полосы разрешенных значений энергии. При больших N это перекрытие и перемешивание состояний будет настолько сильным, что отдельные дискретные уровни неразличимы и можно говорить об образовании разрешённых минизон энергии E_1, E_2, \dots , разделённых областями запрещённых значений энергии (запрещенными значениями, вспомним решение УШ для ТТ).

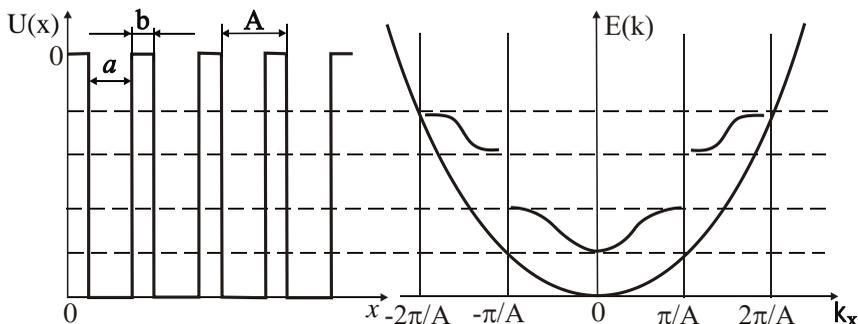


Рисунок 3.4 - Потенциальная энергии сверхрешетки

Такая структура, изображенная на рисунке 3.4, ведёт себя как единое целое и называется *сверхрешёткой* с периодом $A = a + b$.

Свойствами такой одномерной сверхрешётки можно управлять, меняя параметры ямы (a и U) и барьера (b и V_0). Электрон в такой структуре будет вести себя как в одномерном кристалле с периодом A .

При наложении внешнего электрического поля \vec{E}_y перпендикулярно стенкам ямы изменяется её форма, электронный спектр и ВФ.

Решение

УШ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) - qE_y x\right) \Psi(E, x) = E \Psi(E, x)$$

зависит от формы ПЯ $U(x)$ и налагаемых граничных условий.

Решение для прямоугольной ПЯ приводит к следующим выводам:

1. Энергетический спектр КЯ становится непрерывным во всей области определения, то есть вместо дискретных состояний с квантовым числом n и имеющих вид δ -функций с бесконечно узкой шириной, становятся формально разрешёнными состояния с любой энергией. В электронном спектре наблюдается резонансные пики, называемые *резонансами Брейта-Вигнера*. При

$E_{\vartheta} \rightarrow 0$ они переходят в дискретные урны энергии E_n с $\delta E \rightarrow 0$. Размытие электронного спектра и уширение уровней квантования под действием электрического поля вызваны возможностью туннелирования электрона через треугольный потенциальный барьер (рис. 3.3). Чем глубже расположен уровень в яме и чем меньше электрическое поле \vec{E}_{ϑ} , тем шире барьер и тем меньше уширение δE . Положения резонансов E_n зависят от приложенного электрического поля \vec{E}_{ϑ} и при $E_{\vartheta} \rightarrow 0$ они совпадают с уровнями размерного квантования в яме соответствующей формы.

Отметим, что *время жизни* τ связано с уширением δE простым соотношением $\Delta\omega\tau \approx 1$, $\Delta\omega$ – полуширина спектральной линии.

2. Под действием электрического поля происходит смещение ВФ и смещение центра тяжести электронного облака как по энергиям (сдвиг уровня – *штарковский сдвиг*), так и по координате. В симметричной яме электрическое поле снимает вырождение относительно направления движения, что может быть применено в электронных приборах.

В двойной КЯ поле нарушает симметрию структуры. ВФ перекрываются между ямами так, что центры тяжести симметричных и антисимметричных состояний оказываются смещёнными в разные стороны.

3. При некоторых величинах \vec{E}_{ϑ} энергетические уровни соседних ям будут иметь одинаковую энергию. Их значение соответствует процессу "*резонансного туннелирования*" (используется для селективного заселения рабочих уровней в полупроводниковых лазерах).

4. В континууме состояний над КЯ ($E > (U - \frac{qE_{\vartheta}a}{2})$)

появляется дополнительная серия резонансов, положение которых близко к положению уровней в треугольной потенциальной яме с бесконечной стенкой

$$E_n = -qE_0 \frac{a}{2} + \left[\frac{3\pi}{4} \left(2n - \frac{1}{2} \right) \frac{qE_0 \hbar}{\sqrt{2m}} \right]^{2/3}.$$

5. В структурах с резонансным туннелированием зависимость наблюдается вольт-амперная характеристика $I = f(U)$, содержащая участок с *отрицательным дифференциальным сопротивлением* ВС (рост тока при уменьшении напряжения), что представлено на рисунке 3.5, например, у резонансного диода. Данная ВАХ похожа на ВАХ туннельного диода, но из-за меньшей емкости резонансный диод имеет большую скорость переключения. КЯ может быть настолько узкой (5–10 нм), что в ней может быть только один, так называемый резонансный энергетический уровень. Положение точек A , B , C и крутизна характеристик может регулироваться выбором параметров в квантовой структуре. Точка B соответствует напряжению в структуре, при котором энергия электронов совпадает с резонансной и при котором происходит резонансное туннелирование и рост тока.

Примером простейшей двумерной структуры, казалось бы, может быть тонкая металлическая плёнка. Сам факт, что электроны не выходят из металла без внешнего энергетического воздействия, говорит, что они находятся в потенциальном ящике, высота барьеров которого соответствует работе выхода электронов и имеет порядок величины 2–5 эВ, то есть весьма велика.

Однако в металлах электронный газ сильно вырожден и длина волны де Бройля определяется волновым вектором \vec{k}_F

на поверхности Ферми: $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$ (в одномерном кристалле

уровень Ферми – самый верхний из заполненных энергетических уровней при температуре, стремящейся к нулю. Другое его толкование – статистическое: уровень, вероятность заполнения которого при любой температуре равна 1/2; в трёхмерном случае говорят о поверхности Ферми, эти вопросы далее будут рассмотрены далее).

В вырожденном газе длина волны де Бройля электронов зависит от концентрации свободных носителей заряда n

$$\lambda_F = \left(\frac{8\pi}{3n}\right)^{1/3} \quad (\text{для } 3D\text{-систем}),$$

$$\lambda_F = \left(\frac{2\pi}{3n}\right)^{1/2} \quad (\text{для } 2D\text{-систем}),$$

$$\lambda_F = \left(\frac{4}{n}\right) \quad (\text{для } 1D\text{-систем}).$$

Подставив типичные значения n , легко убедиться, что в металлах длина волны де Бройля свободных электронов имеет порядок величины межатомных расстояний, энергетические уровни размыты и эффекта размерного квантования на основе металлических плёнок не проявляется.

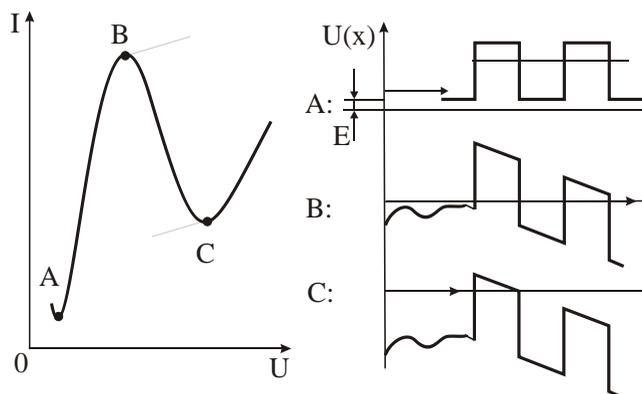


Рисунок 3.5 - Вольт-амперная характеристика и потенциальная энергия структуры с резонансным туннелированием

Реализовать квантовую яму, близкую к прямоугольной, наиболее просто с помощью так называемой *ДГ-структуры* (двойной гетероструктуры). Действительно, если к одиночному гетеропереходу добавить со стороны узкозонного материала ещё один барьер, образованный на контакте с широкозонным материалом, то носители оказываются запертыми в потенциальном ящике, стенки которого образованы двумя гетерограницами. В случае резких гетеропереходов эти стенки близки к вертикальным, а сам тонкий узкозонный полупроводниковый слой (между двумя широкозонными) представляет собой прямоугольную квантовую яму, в

которой движение носителей заряда в плоскости слоя (x, y) происходит без ограничений, а в направлении, перпендикулярном гетерограницам, это движение ограничено и происходит квантование энергетического спектра. Тот факт, что электроны движутся не в свободном пространстве (вакууме), а в материальной среде (например, эпитаксиальном монокристаллическом слое), учитывается введением диэлектрической проницаемости среды с заменой в уравнениях массы свободного электрона m_0 на эффек-

тивную массу m_n^* или m_p^* аналогично тому, как это делается в

обычных кристаллах. В структуре с двумерным электронным газом полная энергия электрона имеет смешанный дискретно-непрерывный спектр, представляя собой сумму дискретных энергий, связанных с движением в направлении квантования z , и непрерывной компоненты, описывающей (как и в 3D-кристалле) движение носителей в плоскости слоя (x, y) как свободных носителей с эффективной массой m^* :

$$E = E_n + \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} = E_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}, \quad (3.1)$$

где p_x, p_y, k_x, k_y – соответствующие компоненты квазиимпульса и волнового вектора. За счёт непрерывной компоненты электроны, принадлежащие одному и тому же уровню E_n , могут иметь любую энергию в интервале от E_n до бесконечности. Такую совокупность состояний для данного квантового числа n называют *подзоной размерного квантования* и изображена на рисунке 3.6.

В общем случае зависимость типа (3.1) может отличаться от квадратичной в плоскости (x, y) вследствие анизотропности свойств материалов (различие параметров в долинах прямозонных и не прямозонных ПП по различным кристаллографическим направлениям).

Если же ограничить движение электрона не по одной, а по двум координатам, то получим двумерную ПЯ, квантование энергии в которой будет подчиняться закономерностям, аналогичным рассмотренным выше. Собственные значения энергии электрона в двумерной КЯ будут зависеть от её параметров, в том числе от

ширины, не только в направлении z , но и во втором направлении, например y , и будут определяться не одним, а двумя квантовыми числами n_1 и n_2 : $E = E_{n_1, n_2}$. По третьей координате x в такой структуре, называемой *квантовой проволокой* или *квантовой нитью* (КН), возможно свободное движение так, что энергия электронов в такой 1D-структуре будет равна:

$$E = E_{n_1, n_2} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}.$$

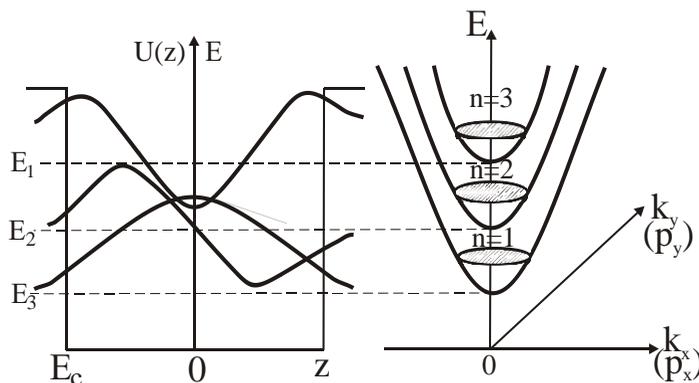


Рисунок 3.6 - Подзона размерного квантования

Аналогично при ограничении движения электрона по трём координатам свободное движение будет невозможно, и такая структура называется *квантовой точкой* (КТ) и обладает размерностью 0 (0D). Квантование энергии происходит по всем трём координатам:

$$E = E_{n_1, n_2, n_3}.$$

КТ обычно формируются за счёт эффектов самоорганизации при эпитаксиальном выращивании структур на основе материалов с существенно различными параметрами решётки (для возникновения напряжения на гетерогранице). Например, при многослойном эпитаксиальном наращивании $InAs$ и твёрдого раствора $In_{1-x}Ga_xAs$ на подложке $GaAs$ при определённых технологических условиях возможно образование как отдельных КТ в виде нанокристаллов, разбросанных по поверхности слоя, так и определённое их упорядочивание, включая наложение

друг на друга, так называемое «складирование» КТ.

ПЯ различной размерности и изменение энергии в них мы уже рассматривали ранее. Следует отметить лишь, что рассмотренные КРЭ для одномерной ПЯ (уширение уровней δE) остаются справедливы и для двумерной и для трёхмерной ПЯ в соответствующих направлениях. Это позволяет формировать энергетический спектр носителей в структуре по своему усмотрению, управлять временем жизни τ в нестационарных состояниях, а также пространственно ограничивать и направлять движение носителей заряда. Кроме того, слои, образующие КЯ могут быть легированы донорными или акцепторными примесями, что также может существенно влиять на энергетический спектр носителей. В квантово-размерных структурах оптические и фотоэлектрические явления определяются теми же фундаментальными процессами взаимодействия света (фотонов) с веществом (атомными системами), которые были рассмотрены нами ранее. Поскольку в квантово-размерных структурах (КЯ, КН, КТ) ВФ как электрона, так и дырки *локализованы* (ограничены в определенной области, высокое отношение поверхности к объёму у наноразмерных объектов), то вероятность излучательной рекомбинации существенно возрастает по сравнению с 3D-структурами. Внутренний квантовый выход (отношение числа излучательных переходов к числу всех переходов в единицу времени) люминесценции может быть близок к единице при условии, что на гетерограницах и в самих структурах концентрация центров безызлучательной рекомбинации мала. Так как различного рода структурные дефекты, дислокации, глубокие центры являются исключительно эффективными центрами безызлучательной рекомбинации, то к качеству квантово-размерных структур и прежде всего к качеству гетерограниц предъявляются довольно жёсткие требования.

Прогресс в направлении исследований и получения наногетероструктур в нашей стране неразрывно связан с именем Нобелевского лауреата по физике (2000 г) Жореса Ивановича Алферова и его учеников-сотрудников Физико-технического института им. А.Ф.Иоффе (г. Санкт-Петербург).

ГЛАВА 4. АТОМ ВОДОРОДА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ ТАБЛИЦА АТОМОВ Д.И. МЕНДЕЛЕВА

4.1 Модель атома Томпсона. Спектр атома водо- рода. Опыты по рассеянию α -частиц. Планетарная модель атома Резерфорда

К началу XX века было окончательно установлено, что атом – не неделимая частица вещества. Это сложная конструкция, в состав которой входят и заряженные частицы.

В 1900 году, изучая природу катодных лучей, английский ученый Джозеф Джон Томпсон (известный в своей среде как “Джи-Джи”) измерил удельный заряд электрона. Из этих опытов следовало, что электроны обладают массой, которая оказывалась много меньшей массы самого легкого атома – атома водорода. Было ясно, что электроны являются составными частями всех атомов. Но атомы, как известно, электронейтральны. Это означало, что в атоме наряду с отрицательными электронами присутствуют и положительно заряженные частицы.

Первая электромагнитная *не квантовая* модель атома была создана Дж.Дж.Томпсоном. В этой работе он руководствовался выводом Кельвина о том, что притяжение атомом внешнего электрона обратно пропорционально квадрату расстояния между их центрами, а притяжение электрона, находящегося внутри самого атома, пропорционально расстоянию между их центрами. Такая закономерность характерна для гравитационной силы притяжения тела Землей в предположении, что масса Земли равномерно распределена по объему земного шара. Эта аналогия наводила на мысль о том, что положительный заряд атома равномерно распределен по всему его объему, а электроны атома плавают в этом положительном облаке. В таком случае несложно вычислить силу, действующую на электрон, например, в атоме водорода $\vec{F} = e\vec{E}$

Для отыскания напряженности поля E в той точке атома, где находится электрон, воспользуемся теоремой Остроградского–Гаусса (см. курс общей физики):

$$\oint_S \vec{E} d\vec{s} = \frac{1}{\epsilon_0} \int_V \rho dV,$$

здесь $\rho = e/V_R$ – объемная плотность положительного заряда атома.

$$E \cdot 4\pi r^2 = \frac{1}{\varepsilon_0} \cdot \frac{e}{V_R} \cdot V_R = \frac{er^3}{\varepsilon_0 R^3} \Rightarrow E = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 R^3} \cdot r,$$

$$F = (-e)E = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^3} \cdot r = -kr.$$

Таким образом, сила, действующая на электрон в подобном атоме, является квазиупругой и непременно приведет к колебаниям электрона относительно центра атома:

$$m\ddot{r} = -kr \text{ или } \ddot{r} + \frac{k}{m}r = 0,$$

$$r = A \cos \omega_0 t.$$

Частота колебаний электрона:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{r}} = \frac{e}{R} \sqrt{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0 R m}}.$$

Это выражение позволяет вычислить радиус атома R считая, что атом излучает электромагнитную волну «реальной» частоты $\omega_0 \approx 10^{15} \text{ с}^{-1}$. Такой расчет дает значение радиуса $R \approx 10^{-10} \text{ м}$. Этот результат (1903 г.) практически совпал с известным к тому времени газокинетическим размером атома. Но это совпадение стало единственным достижением данной модели. *Несостоятельность модели Томпсона проявилась в том, что она не могла объяснить известные к тому времени свойства атомов. Например – закономерности атомных спектров.* Невзаимодействующие атомы излучают электромагнитные волны определенных, характерных для данного вещества частот. Спектр такого излучения состоит из отдельных линий, которые принято объединять в «серии».

В 1885 году швейцарский физик И. Бальмер показал, что, несмотря на кажущийся беспорядок, в распределении этих спектральных линий существуют определенные закономерности. Он нашел, что частоты линий видимой части спектра атомарного водорода могут быть связаны простой формулой

$$\omega = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (n = 3, 4, 5, \dots).$$

Открытие Бальмера усилило интерес к исследованию спектра атомарного водорода. В 1906 г. Т.Лайман обнаружил еще одну серию в ультрафиолетовой области. Позже Ф.Пашен, Ф.Брэккет, А.Пфунд и другие нашли серии в инфракрасном диапазоне. Так возникли

серия Лаймана:

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

серия Пашена:

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

серия Брэккета:

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

Шведский физик Й. Ридберг записал их все одним выражением:

$$\omega = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (4.1)$$

где $m=1, 2, 3, \dots; n=(m+1), (m+2), \dots$

Поскольку основоположником серий был И.Бальмер, формула (4.1) получила название *обобщенной формулой Бальмера*. Коэффициент же пропорциональности здесь $R=2.07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ был назван постоянной Ридберга. Числа $T=R/n^2$ называются *спектральными термами* атома водорода. Частота любой линии атома водорода может быть представлена в виде разности соответствующих термов:

Основы квантовой механики и ее приложения

$$\omega = T_1(m) - T_2(n)$$

Из всех этих эмпирических формул Ритц вывел *комбинационный принцип*, согласно которому для каждого элемента можно найти совокупность таких чисел – спектральных термов, что частота любой спектральной линии данного элемента равна разности спектральных термов этого элемента.

Вплоть до 1913 года было неясно, каким образом можно было бы теоретически истолковать эти серии, а тем более – комбинационный принцип Ритца. Классическая электромагнитная теория объясняла спектральные линии, но их частоты не имели ничего общего с тем, что давал опыт. Эмпирические закономерности спектра атома водорода впервые удалось объяснить после создания *планетарной модели атома Бора-Резерфорда*. Планетарная модель атома родилась в ходе исследования рассеяния α -частиц.

В опыте (1911г.) Эрнеста Резерфорда (1871–1937) пучок α -частиц (${}^4_2\text{He}$ – 2 протона и 2 нейтрона) с энергией 5 МэВ испускались из радиоактивного препарата. Пролетев сквозь щель, попадали на экран из сернистого цинка. Регистрировались α -частицы, рассеянные фольгой, по вспышкам света, возникающим при ударе их об экран, покрытый сернистым цинком (т.е. по сцинтилляции). На экране возникало четкое изображение щели в виде узкой полоски. Затем между щелью и экраном помещалась тонкая металлическая пластина, вернее, тонкая золотая фольга. При этом изображение щели на экране размывалось, что и указывало на рассеяние α -частиц веществом пластинки. Именно в этом эксперименте был установлен поразительный факт: очень небольшая часть α -частиц (примерно 1 из 10000!, $\approx 0,01\%$) рассеивалась на значительный угол, отбрасывалась практически назад – к источнику, т.е. рассеивается на углы, большие 90° . Т.к. золото достаточно легко расплющить и получить толщину \sim сотен атомных, то подобное рассеяние возможно лишь при столкновении с объектами гораздо большей массы.

Из воспоминаний Э. Резерфорда: «...Это было самым невероятным событием в моей жизни. Оно было столь же невероятным, как если бы 15-дюймовый снаряд, выпущенный в кусок папиросной бумаги, отскочил бы и ударил в стреляющего...».

Оценка размера ядра: т.к. кинетическая энергия α -частиц 5 МэВ = $5 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж = $8 \cdot 10^{-13}$ Дж, то перед рассеянием α -частиц ядром они, находясь на расстоянии r_0 , взаимодействуют между собой с потенциальной энергией отталкивания, что изображено

на рисунке 4.1:

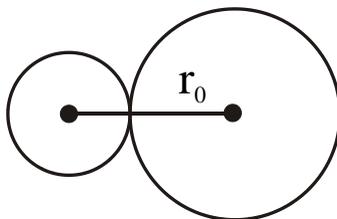


Рисунок 4.1 – Представление о радиусе ядра

$$2e \cdot \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r_0} = 8 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}$$

$$Z_{Au} = 79 \Rightarrow r_0 \approx 5 \cdot 10^{-14} \text{ м; в то же время размер ато-$$

ма был оценен порядка 10^{-10} м или 1 \AA (ангстрем).

4.2 Постулаты Бора и его полуклассическая теория. Опыты Франка и Герца

Итак, из опыта Резерфорда выяснилось, что весь положительный заряд и почти вся масса атома сосредоточены в ядре, находящемся в центре; вокруг ядра движутся электроны, занимая огромную по сравнению с ядром область. При этом сразу же возник вопрос: почему атомы стабильны, т.е. почему электроны не падают на ядро (из-за кулоновской силы)? Если же электрон *ускоренно* движется, вращаясь вокруг ядра, то он должен терять энергию на излучение во всех частотах, падая опять же на ядро. Резерфорд *постулировал* движение электронов по круговым орбитам, так как статическая модель атома с неподвижными зарядами оказывалась неустойчивой системой. Реально наблюдается иная картина (вспомним о линейном спектре атома водорода). Выход в этой, казалось бы, безвыходной ситуации удалось найти в 1913 году датскому физику Нильсу Бору.

Для того чтобы обеспечить устойчивость планетарного атома и объяснить особенности атомных спектров, Бору пришлось дополнить классическую электродинамику элементами квантовой теории, которая априори исключает всякую возможность непрерывного излучения. Свои основные гипотезы Бор сформулировал в виде постулатов (1913 г.):

1. Из бесконечного множества электронных орбит, допускаемых классической механикой, осуществляются только те из них, для которых момент импульса электрона относительно центра его орбиты равен целому кратному постоянной Планка

$$m_e v r = n \hbar. \quad (4.2)$$

Число n называется главным квантовым числом. Указанные орбиты соответствуют так называемым стационарным состояниям атома, находясь в которых атом не излучает электромагнитных волн.

2. Испускание (или поглощение) энергии происходит не непрерывно, как это принимается в обычной электродинамике, а только при переходе системы из одного «стационарного» состояния в другое. Такое излучение (или поглощение) при переходе системы из одного стационарного состояния в другое, монохроматично. Соотношение между его частотой ω и общим количеством излученной энергии ΔE дается равенством

$$\Delta E = E_n - E_m = \hbar \omega.$$

Здесь E_m и E_n – энергии атома в двух стационарных состояниях.

Динамическое равновесие системы в стационарном состоянии определяется обычными законами механики, тогда как для перехода системы между различными стационарными состояниями эти законы не действительны. Поэтому разработанные Бором представления в истории физики получили название *полуклассической теории*.

Модель простейшего атома – атома водорода состоит из двух точечных зарядов – положительно заряженного ядра ($+e$) и одного электрона ($-e$), обращающегося вокруг него с постоянной частотой. Пусть электрон движется со скоростью v по одной из доступных ему траекторий (r_n). Запишем классическое уравнение движения электрона (II закон Ньютона) и квантовое условие Бора:

$$\begin{cases} \frac{ke^2}{r_n^2} = m_e \frac{v^2}{r_n}, \\ m_e v r_n = n \hbar. \end{cases} \quad (4.3)$$

Основы квантовой механики и ее приложения

Решая совместно, можно получить условие квантования орбит – электрону в атоме водорода доступны круговые орбиты следующих радиусов:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{ke^2 m_e} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (4.4)$$

Радиус первой орбиты ($n=1$) называется боровским радиусом атома r_0 . Он равен

$$r_n = \frac{\hbar^2}{ke^2 m_e} \approx 0.5 \cdot 10^{-10} \text{ м},$$

что неплохо согласуется с газокинетическим размером атома.

Вычислим внутреннюю энергию атома, которая складывается из кинетической энергии электрона и потенциальной энергии его взаимодействия с ядром.

Запишем при этом и уравнение движения электрона:

$$\begin{cases} E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{ke^2}{r}, \\ \frac{m_e v^2}{r} = \frac{ke^2}{r^2}. \end{cases}$$

Отсюда следует, что энергия атома

$$E = \frac{ke^2}{2r} - \frac{ke^2}{r} = -\frac{ke^2}{r}. \quad (4.5)$$

Воспользовавшись результатом (4.4), получим спектр энергий, доступных атому:

$$E = -\frac{k^2 e^4 m_e}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (4.6)$$

При переходе электрона с n -й орбиты на m -ю, атом излучает фотон. Его энергия

$$\hbar\omega = E_n - E_m = -\frac{k^2 e^4 m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (4.7)$$

Частота этого излучения определяет одну из линий в спектре атома водорода.

$$\omega = \frac{k^2 e^4 m_e}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (4.8)$$

Сравнивая этот результат с обобщенной формулой Бальмера, приходим к выводу, что $R = \frac{k^2 e^4 m_e}{2\hbar^3} \approx 10^{16} \text{ с}^{-1}$ – постоянная Ридберга.

Поразительно численное совпадение этой константы, рассчитанное по Бору, с тем значением, которое было получено в результате анализа спектра излучения атома водорода!

Таким образом, уравнение (4.8) дает все частоты, присутствующие в излучении атома водорода. Это был грандиозный успех планетарной модели атома Резерфорда и боровской теории этой модели. Стало ясно, как возникают спектральные линии и серии в атомарном излучении. На рисунке 4.2 представлен масштабный чертеж 5 низших боровских орбит водорода.

При движении электрона по одной из этих доступных ему орбит, атом находится в стационарном состоянии и не излучает и не поглощает энергию.

При переходе электрона, например, со второй орбиты ($N=2$) на первую ($N=1$) излучается фотон соответствующей частоты. В спектре излучения этот переход отмечен одной из линий в серии Лаймана.

Эта серия включает частоты фотонов, излучаемых при переходе с любой орбиты на первую.

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

Все переходы с орбит $n > 2$ на вторую рождают различные линии серии Бальмера:

$$\omega = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \text{ и так далее.}$$

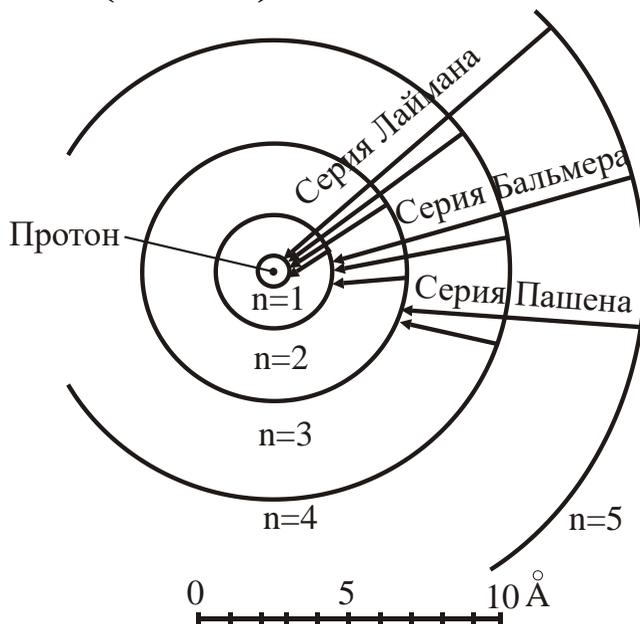


Рисунок 4.2 – Схема пяти первых боровских орбит атома водорода

Боровская теория наглядно объясняет и комбинационный принцип Ритца. Обратный переход электрона с одной из нижних орбит на более высокую возможен лишь при поглощении атомом энергии извне. Объяснить же особенности спектра уже следующего элемента – гелия полуклассическая теория Бора не могла – не была еще разработана квантовая механика.

Во время последнего посещения Нильсом Бором Москвы (1961 г.) выдающийся российский физик П.Л.Капица сказал: "Атом Бора – это не атом бора, а атом водорода" (игра слов: бор – пятый элемент таблицы Д.И.Менделеева).

Прямым экспериментальным подтверждением квантованности электронных орбит в атоме и его энергии явился эксперимент Франка и Герца, установка для проведения, которого изображена на рисунке 4.3, по облучению электронами паров ртути при давлении $p \sim 1$ мм.рт.ст. (1913 г.).

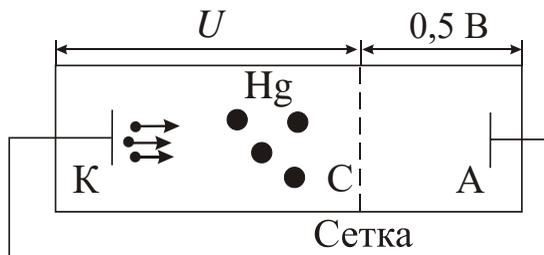


Рисунок 4.3 – Схема установки Франка и Герца

Напряжение U_{KC} между подогреваемым катодом К и сеткой С ускоряет электроны, а напряжение 0,5 В между сеткой С и анодом А – тормозит. Согласно классической физике с *монотонным* ростом U_{KC} должен *монотонно* расти анодный ток I_A . Реально же наблюдается вольт-амперная характеристика (ВАХ), приведенная на рисунке 4.4. На участке ОМ ток монотонно возрастает, энергия электронов растёт, они сталкиваются с атомами ртути упруго (практически не теряя энергии). На участке MN электроны сталкиваются с атомами ртути не упруго, теряют энергию и не могут преодолеть запирающего напряжения в 0,5 В. Последующие максимумы M_i вызваны многократными неупругими столкновениями электронов с атомами ртути.

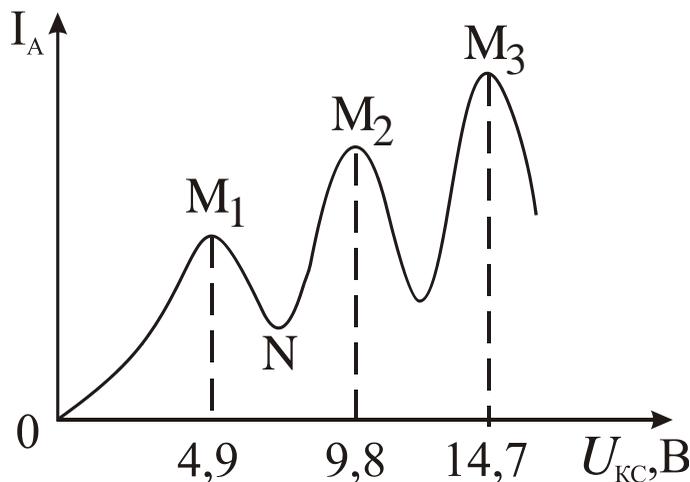


Рисунок 4.4 - Вольт-амперная характеристика, наблюдаемая в эксперименте Франка и Герца

Так как при столкновениях электроны взаимодействуют в основном с электронной оболочкой атомов ртути, то, очевидно, что в атомах электроны поглощают энергию только строго определёнными порциями $\Delta E_1 = E_2 - E_1$, $\Delta E_2 = E_3 - E_1$ и так далее. При этом, переходя из возбуждённого состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией, атомы ртути должны излучать с частотой $\nu = \Delta E_1 / h \approx 235 \text{ нм}$. Линия была обнаружена, что явилось доказательством верности полуклассической теории Н.Бора.

Кроме двух вышеупомянутых опытов, поставивших много вопросов, следует упомянуть о трудностях в отношении дискретного (избирательного) излучения и поглощения светом (линейчатые спектры атомов и молекул), о расхождении экспериментальной и теоретической зависимостей теплоёмкости от температуры (т.н. «катастрофе с теплоёмкостью»), расхождении теоретической и экспериментальной зависимостей от длины волны λ (частоты ν) и температуры спектральной плотности энергетической светимости (т. н. «ультрафиолетовой катастрофе»), и т.д.

4.3 Атом водорода в квантовой механике. Квантовые числа как результат решения уравнения Э.Шредингера и уравнения П.Дирака. Правила отбора

Так как длина волны де Бройля движущегося в атоме электрона сравнима с размерами атома, то пренебрегать волновыми свойствами электрона и описывать его движение классическими законами нельзя. Рассмотрим движение электрона в электрическом поле неподвижного ядра с зарядом $+Ze$ ($Z = 1$ (для водорода), 2, 3,...).

Потенциальная энергия электрона в электрическом поле ядра

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

Необходимо найти регулярные решения стационарного УШ

$$\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}\right)\Psi = E\Psi. \quad (4.9)$$

Так как при решении используется в силу симметрии ССК, то УШ примет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\Psi + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2\Psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\Psi = E\Psi. \quad (4.10)$$

где в ССК $\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\Theta,\varphi}$ оператор Лапласа, а

$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$ – радиальная часть оператора,

$\Delta_{\Theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ – угло-

вая часть оператора; в ССК оператор квадрата момента импульса

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\Theta,\varphi}.$$

С учётом замен после решения УШ (4.10) для атома водорода можно получить условие квантования полной энергии электрона в атоме:

$$E_n = -\frac{Z^2me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (4.11)$$

что совпадает с полученным в теории Н.Бора (см. формулу (4.6)).

ВФ $\Psi_{nlm}(\rho, \Theta, \varphi) = x_{n,l}(\rho)Y_{l,m}(\Theta, \varphi)$ зависит от трёх квантовых чисел: n, l, m .

Рассмотрим ряд значений квантовых чисел n, l, m и вид соответствующих ВФ, приведенных в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Значения квантовых чисел и выражения для соответствующих ВФ

n	l	m	Ψ_{nlm}	Состояние
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp(-\rho)$	1s
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} (2-\rho) \exp(-\frac{\rho}{2})$	2s
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp(-\frac{\rho}{2}) \cos \Theta$	2p
2	1	+1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp(-\frac{\rho}{2}) \sin \Theta \exp(i\varphi)$	2p
2	1	-1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp(-\frac{\rho}{2}) \sin \Theta \exp(-i\varphi)$	2p

Главное квантовое число $n=1, 2, \dots$ (см. формулу (4.11)) определяет не только полную энергию электрона в атоме (являются собственными значениями гамильтониана, в связанном состоянии энергетический спектр атома водорода дискретен, лежит в области отрицательных значений и имеет точку сгущения $E=0$), но и размеры электронного облака. Для того, чтобы увеличить размеры электронного облака (вспомним смысл квадрата модуля Ψ -функции $|\Psi|^2$), надо удалить электрон на большее расстояние от ядра. Для преодоления кулоновского притяжения при этом нужны затраты энергии. Так как электроны с одинаковым значением главного квантового числа n образуют приблизительно одинакового размера электронные облака, то есть смысл говорить об электронных облаках или слоях с определённым значением n . Принято обозначать уровни с n так, как представлено в таблице 4.2:

Таблица 4.2 – Принятые обозначения уровней

(n=)	1	2	3	4	5	6	7
уровни	K	L	M	N	O	P	Q

Орбитальное, побочное или азимутальное квантовое число l может иметь значения $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$. Говорят, что уровень энергии E_n будет *вырожден* с кратностью n^2 .

Стационарные ВФ $\Psi_{nlm}(\rho, \Theta, \varphi)$, описывающие различные квантовые состояния атома, являются собственными функциями не только оператора полной энергии \hat{H} , но и оператора квадрата момента импульса \hat{L}^2 (2.13), то есть

$$\hat{L}^2 \Psi_{nlm} = l(l+1)\hbar^2 \Psi_{nlm}.$$

В любом квантовом состоянии модуль орбитального момента импульса движущегося в атоме электрона однозначно определяется орбитальным квантовым числом l :

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (4.12)$$

что не совпадает с постулируемым в теории Н.Бора равенством (4.2), так как, согласно (4.1), невозможно состояние с $L=0$. Квантовое число l определяет форму электронного облака. В одноэлектронных атомах значение энергии электрона определяется главным квантовым числом n , в многоэлектронных оно ещё зависит и от l , поэтому состояния электрона с различными значениями l принято называть энергетическими подуровнями, обозначения которых представлены в таблице 4.3

Таблица 4.3 – Обозначения энергетических подуровней

l	0	1	2	3	4
 	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>

Состояние электрона записывается, например, в виде $1s^1$ или $2p^5$ и так далее. Форма электронного облака определяется граничной поверхностью, заключающей в себе с наибольшей вероятностью (а, следовательно, и $|\Psi|^2$) приблизительно 90 % заряда и массы электрона.

Анализ свойств ВФ показывает, что все s – состояния

Основы квантовой механики и ее приложения

(состояния с $l=0$ и $m=0$) являются сферически симметричными состояниями, ВФ в этих состояниях не зависит от угловых переменных Θ и φ .

Образ атома в квантовой теории можно представить в виде облака плотности вероятности $|\Psi|^2$, изображенного на рисунке 4.5

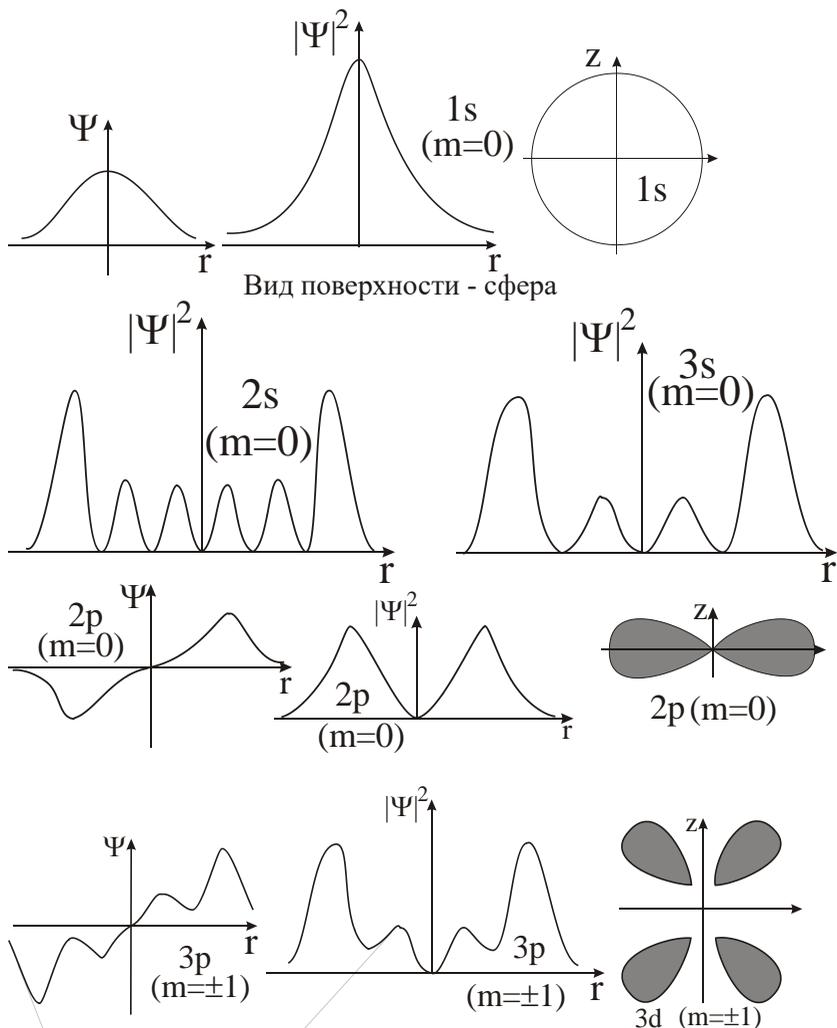


Рисунок 4.5 – Волновые функции и орбитали в квантовой теории

Гантелеобразная форма 3d-орбитами может быть различным образом ориентирована в пространстве, данная ориентация определяется магнитным квантовым числом. Всего $2l+1$ значений $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ квантового числа m . Проекция момента импульса электрона на выдаваемое в пространстве направление z может иметь только определённые значения

$$L_z = m\hbar. \quad (4.13)$$

Направление z в пространстве обычно выделяется внешним магнитным или электрическим полем (рис. 4.6). Формулу (4.13) называют *формулой пространственного квантования*, а (4.12) – *формулой квантования момента импульса*.

4.4. Принцип Паули. Периодическая система элементов Д.И.Менделеева

Сравнивая формулы (4.12) и (4.13), можно заметить, что максимальное значение проекции момента импульса $\hbar l$ не равно по модулю $\hbar\sqrt{l(l+1)}$, а меньше его.

Это связано с тем, что проекции на две различные координатные оси не могут быть определены одновременно точно. Поэтому невозможно точное совпадение направления вектора орбитального момента импульса с направлением оси z .

Любая система в природе стремится прийти в состояние с минимальной энергией. Электроны же в действительности образуют при переходе из состояния в состояние иерархические структуры с определённой закономерностью – периодическим законом. Он основывается на двух принципах:

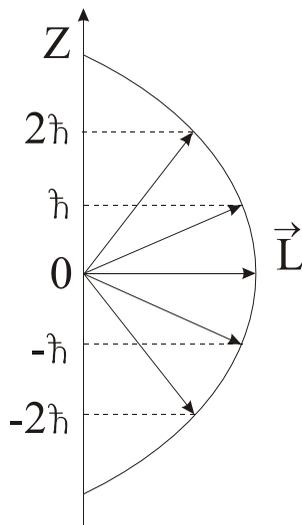


Рисунок 4.6
Пространственное квантование момента импульса электрона в атоме

Основы квантовой механики и ее приложения

1) *принцип Паули (или исключения)*: каждый электрон в атоме характеризуется своим набором квантовых чисел;

2) *принцип минимума энергии*: при заданном общем числе электронов в атоме осуществляется состояние с минимумом потенциальной энергии (условие устойчивости системы).

Заполнение оболочек по идеальной и реальной схемам представлено в таблице 4.4.

Таблица 4.4 – заполнение оболочек по идеальной и реальной схемам

/		0	1	2	3	4	идеал. схема	реал. схема
n		s	p	d	f	g		
1	K	2	–	–	–	–	2	2
2	L	2	6	–	–	–	8	8
3	M	2	6	10	–	–	18	18
4	N	2	6	10	14	–	32	18
5	O	2	6	10	14	18	50	18

Реальные отличия обусловлены тем, что поле не является чисто кулоновским и между электронами существуют силы взаимодействия.

Последовательность заполнения атомных электронных оболочек была исследована (в советское время) В.М. Клечковским и происходит в соответствии с двумя сформулированными им правилами:

1. При увеличении заряда ядра атома последовательное заполнение электронных оболочек происходит от орбиталей с меньшим значением суммы главного квантового числа n и орбитального квантового числа l к орбиталям с большим значением $(n+l)$, например, $3d$ ($n=3, l=2, n+l=5$) и $4s$ ($n=4, l=0, n+l=4$), то есть $4s$ состояние заполняется раньше, чем $3d$.

2. При одинаковых суммах $(n+l)$ орбитали заполняются в направлении роста главного квантового числа n , например, сначала $3d$ ($n+l=5, n=3, l=2$), затем $4p$ ($n+l=5, n=4, l=1$), потом $5s$ ($n+l=5, n=5, l=0$).

Появление в шредингеровской теории атома водорода, в отличие от теории Бора, квантования момента импульса L и его проекции L_z объясняет некоторые особенности спектров излучения и поглощения атома водорода, которые не могли быть объяснены теорией Бора. Для пояснения этих особенностей изобразим

Основы квантовой механики и ее приложения

схему уровней атома водорода, на которой учтено вырождение уровней по азимутальному квантовому числу l , на рисунке 4.7

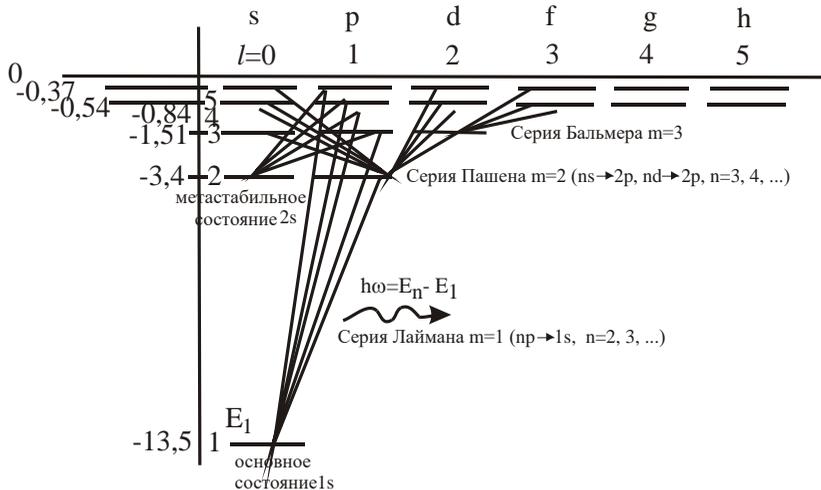


Рисунок 4.7 - Схема уровней атома водорода, учитывающая вырождение уровней по азимутальному квантовому числу l

На приведенной схеме по вертикали отложена полная энергия E_n электрона в атоме водорода, выраженная в электрон-вольтах (эВ) и значения главного квантового числа n . По горизонтали отложены дискретные значения азимутального квантового числа l вместе с их спектроскопическими обозначениями. Линии, соединяющие энергетические уровни, обозначают *разрешенные правилом отбора* переходы электрона с одного энергетического уровня на другой. При этом или испускаются, или поглощаются фотоны соответствующих энергий $\varepsilon = E_n - E_m$. Правило отбора связано с тем, что фотон обладает *собственным моментом импульса*. При излучении света фотон уносит момент импульса из атома, а при поглощении – приносит. Поэтому, вследствие закона сохранения момента импульса, момент импульса атома в процессах излучения и поглощения фотонов изменяется. Оказывается, с наибольшей интенсивностью идут такие переходы, в которых выполняется следующее правило отбора:

$$\Delta l = \pm 1. \quad (4.14)$$

Это правило отбора справедливо для так называемых *дипольных переходов*. Оно запрещает, например, дипольный переход электрона из состояния $2s$ в состояние $1s$, разрешенный зако-

ном сохранения энергии. Поэтому электрон может сравнительно долго находиться в состоянии $1s$, если он туда попадает. Такое состояние называется *метастабильным*.

Так как стационарные значения энергии атома водорода в теории Бора и в теории Шредингера совпадают, то в первом приближении из теории Шредингера следуют такие же спектры излучения и поглощения, как и в теории Бора. Однако теория атома водорода Шредингера позволяет учесть влияние на энергетические уровни взаимодействия орбитального и *спинового* моментов импульса электрона (*тонкая структура спектра*). Кроме того, теория Шредингера (или более общая релятивистская теория П.Дирака) позволяет учесть влияние на спектры магнитного поля (эффект Зеемана) и электрического поля (эффект Штарка). Расщепление спектральных линий в магнитном поле получило название *эффекта Зеемана*, в электрическом – Штарка, а в электромагнитном – Зеемана–Штарка. Оно происходит из-за наличия особой квантовой характеристики электронов – спина. Как уже упоминалось выше, спектральные линии атома водорода обнаруживают тонкую структуру. Тонкая структура присуща спектрам всех атомов. Для объяснения причин возникновения тонкой структуры американские физики С. Гаудсмит и Дж. Уленбек выдвинули в 1925 году гипотезу о том, что электрон обладает собственным моментом импульса – спином L_s , не связанным с движением электрона в пространстве (англ. *spin* – кружение).

Только в научно-популярной литературе спин объясняется как момент импульса электрона при вращении электрона вокруг своей оси. На самом деле классического аналога спина нет, спин – чисто квантовая неотъемлемая характеристика частицы, такая же, как заряд, масса и т.д.

Модуль собственного момента импульса определяется спиновым квантовым числом s :

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad (4.15)$$

Для электрона $s=1/2$, согласно *принципу Паули (или исключения)* в одном и том же энергетическом состоянии могут находиться только два электрона, с разными спиновыми числами $s=+1/2$ и $s=-1/2$ (при одинаковых n, l, m).

Проекция спина на ось z L_{sz} квантуется

$$L_{sz} = m_s \hbar. \quad (4.16)$$

здесь m_s – магнитное спиновое квантовое число. Для электрона

$$m_s = \pm s = \pm 1/2. \quad (4.17)$$

Таким образом, квантовое состояние электрона в любом атоме задается четырьмя квантовыми числами:

главным n ($n=1, 2, 3, \dots$);

азимутальным l ($l=0, 1, 2, \dots, n-1$);

магнитным m ($m=-l, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l$);

спиновым m_s ($m_s = +1/2, -1/2$).

Учет взаимодействия спиновых магнитных моментов ядра и электрона приводит к *сверхтонкому расщеплению* уровня $1s$ атома водорода на два подуровня. Переход электрона между этими подуровнями приводит к излучению (или поглощению) радиоволн с длиной волны $\lambda=21$ см. Такое излучение испускается межзвездным водородом в галактиках. Изучая это излучение с помощью радиотелескопов, астрономы получают много полезной информации.

ГЛАВА 5. СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

5.1 Химические связи и энергетические уровни в молекулах, строение молекул

Наименьшей частицей вещества, носителем его физических и химических свойств, является атом или молекула как структура из атомов.

Химическая связь (ХС) – связь между атомами в молекуле или молекулярном соединении, возникающая в результате либо переноса электрона с одного атома на другой, либо обобществления электронов парой (или группой) атомов. Описать взаимодействие электронов только как кулоновское отталкивание одноименных зарядов нельзя, здесь следует учитывать обменное взаимодействие частиц, являющееся чисто квантовым явлением. Расчеты показывают, что обменное взаимодействие выгодно, так как с образованием общей структуры (молекулы, многоатомной группы, кристалла) энергия системы уменьшается, а ее устойчивость повышается. Следует вспомнить о выделении теплоты (энергии) фазового перехода I рода при кристаллизации расплава, т.е. при энергетически выгодном образовании кристалла. При образовании молекулы также выделяется энергия, равная работе ее образования, что говорит об уменьшении энергии системы.

Например, при сближении двух водородоподобных (простейших) атомов расчетная зависимость потенциальной энергии U (энергии взаимодействия) имеет вид кривой, приведенной на рисунке 5.1. Межатомное расстояние r_0 , соответствующее равновесному положению атомов при минимуме энергии системы, называют длиной связи.

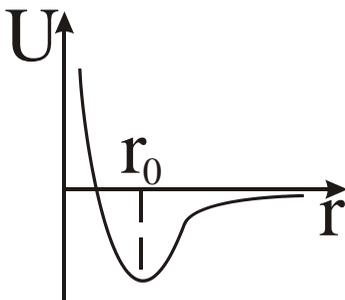


Рисунок 5.1 – Вид расчетной зависимости потенциальной энергии U от радиальной координаты

Основные виды ХС – *ковалентная (гомеополярная или обменная) и ионная (электровалентная).*

В 1916 году американским ученым Дж.Льюисом была высказана гипотеза о том, что взаимодействие между атомами в молекуле существует, в основном, между внешними – валентными – электронами. Данная идея лежит в основе современной теории ковалентной связи. В том же году немецкий ученый В.Коссель предположил, что один из взаимодействующих атомов перетягивает одеяло (чужой электрон) на себя. Кратность ковалентной ХС равна числу пар обобществленных электронов (двойная, тройная ХС и т.д.). Электроны в паре должны иметь противоположные спины. При резком разделении электронов образуются положительный и отрицательный ионы, поэтому ионная ХС часто рассматривается как предельный случай ковалентной ХС. Потому же нельзя говорить о чисто ковалентной или чисто ионной ХС, а лишь о преимущественно ионном или ковалентном характере ХС. Частично ионную и частично ковалентную ХС называют *семиполярной*.

Выделяют также *металлическую и водородную ХС.*

Металлическая ХС характерна для веществ – металлов, в которых образующийся в результате большой концентрации электронов электронный газ удерживает на определенном расстоянии положительные ионы (обозначаются узлы кристаллической решетки металла).

Водородная связь – промежуточный вид ХС между ковалентной ХС и невалентным межатомным взаимодействием при участии атома водорода. Электрон атома водорода относительно слабо связан с ядром и легко смещается к соседнему электроотрицательному атому, например, в органике обычно кислород (*O*), азот (*N*), фосфор (*P*) и т.п. В результате оголяющееся ядро атома водорода (протон) создает условия для сближения атомов *O–O*, *N–O* и т.п.

5.2 Энергетические уровни в молекулах. Молекулярные спектры. Комбинационное рассеяние света

При образовании молекул оптические спектры веществ изменяются по сравнению с атомными спектрами излучения и поглощения, рассмотренными ранее, например, для атома водорода. Молекулярные спектры значительно сложнее, так как кроме движения электронов относительно двух и более ядер в молекуле

происходит колебательное движение ядер вместе с окружающими их внутренними электронами около положения равновесия и вращательное движение молекулы как целого. Соответственно рассматривают электронные, колебательные и вращательные уровни энергии $E_{эл}$, $E_{кол}$, $E_{вр}$ и три типа молекулярных спектров. По порядку величины

$$E_{эл} : E_{кол} : E_{вр} = 1 : \sqrt{m/M} : m/M \quad \text{или}$$

$$E_{эл} \gg E_{кол} \gg E_{вр},$$

где m – масса электрона, а M – масса ядра в молекуле.

Система уровней энергии молекулы характеризуется совокупностями далеко отстоящих друг от друга электронных уровней энергии $E_{эл}$ (при заданных значениях $E_{кол}$ и $E_{вр}$), расположенных значительно ближе друг к другу колебательных уровней энергии $E_{кол}$ (при заданных значениях $E_{эл}$ и $E_{вр}$) и еще более близких друг к другу вращательных уровней энергии $E_{вр}$ (при заданных значениях $E_{эл}$ и $E_{кол}$).

В результате переходов электронов между различными уровнями $E_{эл}$, $E_{кол}$ и $E_{вр}$ образуются полосатые молекулярные спектры. Вспомним, что каждому энергетическому уровню соответствует испускание (поглощение) излучения не с определенной частотой (длиной) волны, а с частотой (длиной) волны в определенном интервале $\nu_{ср} - d\nu < \nu < \nu_{ср} + d\nu$ вследствие рассмотренного ранее (см. глава 1) известного соотношения неопределенностей для энергии и времени $\Delta E \Delta t \geq \hbar$.

Если на вещество падает монохроматический свет, то кроме основной частоты этого света ν в спектре будут наблюдаться симметричные относительно нее линии с частотами $\nu - \nu_i$ – *стоксовы* или *красные спутники* и $\nu + \nu_i$ – *антистоксовы* или *фиолетовые спутники*. Здесь ν_i – одна из собственных частот колебаний молекулы. Таким образом, частоты новых линий в спектре рассеяния являются комбинациями частот падающего света и частот колебательного и вращательного переходов рассеивающих молекул. Отсюда и название этого явления – *комбинационное рассеяние света*.

По молекулярным спектрам проводят анализ строения и свойств вещества, определяют наличие в нем примесей.

5.3 Рентгеновское излучение. Тормозной и характеристический рентгеновские спектры. Закон Мозли

Рентгеновским (РИ) называется излучение с длиной волны примерно 10^{-9} – $6 \cdot 10^{-12}$ м. Иногда указывают более широкий интервал: 10^{-7} – 10^{-14} м (от 10^3 до 10^{-4} Å). Напомним, что с уменьшением длины волны растет частота и, следовательно, энергия и проникающая способность излучения. РИ с длиной волны менее 2 Å условно называют жестким, а с длиной волны более 2 Å условно называют мягким.

Источниками РИ являются рентгеновские трубки, радиоактивные изотопы (отсюда постоянно везде существующее – фоновое РИ), ускорители частиц.

В рентгеновской трубке ускоренные электрическим полем электроны (возможно использовать и высокоэнергетичные ионы, например, α -частицы) бомбардируют металлический анод (мишень). При столкновении ускоренных электронов с атомами мишени электроны теряют свою энергию на излучение и ионизацию атомов анода. Так как разброс энергии бомбардирующих электронов велик, то при торможении на аноде они излучают с любой возможной длиной волны в рентгеновском диапазоне. Такое излучение называется тормозным РИ, а соответствующий рентгеновский спектр – *тормозным спектром РИ*. *Тормозное РИ имеет сплошной спектр*, по которому ничего конкретного о мишени сказать нельзя. При торможении бомбардирующих электронов атомами мишени происходит ионизация атомов мишени, в результате которой электроны с одной из внутренних оболочек выбрасываются из атома (первичное РИ) либо происходит поглощение кванта присутствующего электромагнитного излучения (флуоресцентное РИ). Ионизированный атом через малое время 10^{-16} – 10^{-15} с переходит из возбужденного состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией с излучением кванта определенной частоты. Так как энергетические уровни в атоме имеют строго определенные дискретные значения энергии, то в результате такого процесса образуются специфические линейчатые спектры РИ, характерные для каждого элемента мишени (анода). Линейчатый спектр РИ и называют *характеристическим спектром РИ*. По характеристическому спектру уже можно кое-что сказать о составе мишени. Исследуя характеристические спектры английский физик Г.Мозли (1887–1915) в 1913 году сформулировал *закон (Мозли)*:

$$\nu = R(Z - \sigma)^2 \left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right],$$

(5.1)

где ν – частота линии характеристического РИ;

$$R = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1} - \text{постоянная Ридберга};$$

Z – атомный номер элемента мишени;

σ – постоянная экранирования;

$m=1, 2, 3, \dots$ – определяет рентгеновскую серию, соответственно K, L, M, ...;

$n=m+1, m+2, m+3, \dots$ – определяет конкретную отдельную линию в соответствующей серии. Закон Мозли подобен обобщенной формуле Бальмера (4.7).

Постоянная экранирования вводится потому, что на электрон, совершающий переход, соответствующий некоторой линии, действует не весь заряд ядра Ze , а меньший. Меньший потому, что внутренние электроны закрывают собой ядро, поэтому для K-серии принимают $\sigma = 1, n=1, m=2, 3, \dots$

При взаимодействии РИ с веществом может наблюдаться внешний фотоэффект с поглощением РИ. При этом из атома вырывается внутренний электрон, после чего возможны излучательный переход с испусканием характеристического РИ, либо выброс второго, так называемого оже-электрона при безызлучательном переходе. В случае неметаллической кристаллической решетки возможно возникновение дефектов решетки. Воздействие на живые организмы РИ разрушительно вследствие ионизации атомов и молекул тканей и органов.

ГЛАВА 6. ОСНОВЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА (ЧАСТЬ I)

6.1 Вырожденные и невырожденные коллективы частиц. Фазовое пространство и его квантование. Химический потенциал. Понятие о квантовых статистиках. Функции распределения Максвелла-Больцмана, Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака

При рассмотрении ансамблей (систем), состоящих из большого числа частиц, событий и т.п., начинают проявляться особые – статистические – закономерности. Например, при бросании монеты три раза подряд может выпасть «орел», хотя вероятность выпадения и «орла», и «решки» одинакова и равна 0,5, т.е. это события равновероятные. Почему события равновероятные, а три раза выпал «орел»? Дело в том, что данные события равновероятны с точки зрения статистики и теории вероятности: при большом числе испытаний (бросаний монеты), например, 10000, число выпадений «орла» и «решки» будет примерно одинаковым, что и указывает на их равновероятность. Это и называется статистической закономерностью, которые начинают проявляться при рассмотрении большого числа однотипных событий (испытаний), движения частиц в коллективах, состоящих из множества тождественных (одинаковых) частиц, и т.п.

Квантовая статистика – раздел статистической физики, исследующий системы, состоящие из огромного количества квантовых частиц, поведение которых описывается уже неклассически, квантовыми закономерностями (неклассической, квантовой механикой). В макром мире все величины изменяются непрерывно (имеют сплошной спектр значений), даже при совпадении всех характеристик частиц одного вида, можно различить их, следя за их траекторией. В классической статистической физике частицы считаются различимыми, т.е. при локализации двух одинаковых частиц в небольшой области пространства мы в любой момент времени можем сказать, где находится первая и вторая частицы. В квантовой механике вследствие корпускулярно-волнового дуализма свойств вещества и соотношения неопределенностей Гейзенберга–Бора тождественные (с одинаковой массой, зарядом, спином, энергией, т.д.) частицы считаются неразличимыми, при этом перестановка частиц местами не изменяет в целом физическое состояние системы. Для волновых функций, описывающих движение двух тождественных квантовых частиц, их неразличи-

мость (перестановка местами) означает умножение на несущественный фазовый множитель $\exp(i\alpha)$:

$$\Psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots) = \Psi(\dots, x_k, \dots, x_j, \dots) \cdot \exp(i\alpha).$$

Если же записать $\Psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots) = \Psi(\dots, x_j, \dots, x_k, \dots) \cdot \exp(2i\alpha)$

, то с учетом $\exp(2i\alpha) = 1$, $\exp(i\alpha) = \pm\sqrt{1} = \pm 1$ делается вывод о том, что волновая функция при перестановке частиц местами либо меняет свой знак, либо не изменяется вообще. При перемене знака говорят об антисимметричных волновых функциях, без смены знака – о симметричных волновых функциях.

Как отмечалось выше, в научно-популярной литературе *спин* описывается как собственный механический момент при вращении частицы вокруг собственной оси. На самом деле это не так. Спин является квантовой, не имеющей классического аналога характеристикой, такой же, как заряд частицы, ее масса и т.п. Системы частиц с целым или нулевым спином (*бозоны*) описываются симметричными, с полуцелым спином (*фермионы*) – антисимметричными волновыми функциями. Бозонами являются фотоны, фононы, куперовские электронные пары, т.д. Фермионами являются электроны, позитроны, протоны, нейтроны, т.д. Для фермионов выполняется *принцип запрета Паули*: в системе, состоящей из одинаковых фермионов, не может быть даже двух частиц, находящихся в одинаковом квантовом состоянии с одинаковым набором всех четырех квантовых чисел. Если мы при абсолютном нуле температуры будем кидать бозоны в одну энергетическую яму, а фермионы в другую, то картины будут различными: фермионы будут занимать различные энергетические уровни, а бозоны – первый, причем, чем больше бозонов будет находиться в данном энергетическом состоянии, тем легче последующим бозонам в него входить и тем труднее из него выходить (бозе-конденсация).

Это проявляется при явлениях сверхпроводимости (сверхтекучести). При температурах сверхпроводимости (около 0 К) образуются электронные пары – куперовские пары, причем, чем их больше, тем все больше их образуется.

При учете неразличимости частиц теряет смысл утверждение о том, что первая частица находится в состоянии 1, а вторая – 2. В этом случае говорят о непрерывной смене состояний 1 и 2, не конкретизируя, какое состояние соответствует данной частице.

Это не следует понимать, как физическое непрерывное перемещение частиц, а лишь как условный, виртуальный образ.

В простейшем случае для одноатомного газа (пренебрегая внутренней структурой молекул, считаем их материальными точками) состояние молекулы описывается тремя координатами (x , y , z) и тремя составляющими импульса (p_x , p_y , p_z). Если в системе N частиц, то их состояние описывается N точками в шестимерном пространстве – так называемом *фазовом пространстве* или μ -пространстве. По аналогии с обычным пространством вводится понятие фазового объема в μ -пространстве

$$d\Gamma = \underbrace{dx dy dz}_{dV} \underbrace{dp_x dp_y dp_z}_{dV_p} = dV \cdot dV_p,$$

(6.1)

где dV – элемент пространства конфигураций, dV_p – элемент пространства импульсов, исходя из соотношения неопределенностей (1.4) элемент объема фазового пространства имеет величину

$$d\Gamma = dx dp_x \cdot dy dp_y \cdot dz dp_z \geq 2\pi\hbar \cdot 2\pi\hbar \cdot 2\pi\hbar, \quad \text{т.е.}$$

минимальный элемент объема фазового пространства, соответствующего одному, данному состоянию частицы

$$d\Gamma = (2\pi\hbar)^3, \quad (6.2)$$

где \hbar – постоянная Планка.

В зависимости от симметрии задачи может быть удобным как в пространстве конфигураций, так и в пространстве импульсов в качестве элементов объема выбирать не декартовы прямоугольные параллелепипеды, а, например, шаровые слои.

Пусть дан одномерный (координата x) одноатомный газ в поле тяготения с массой молекулы m . Классически имеем: кинетическая энергия молекулы $p^2/(2m)$ (p – импульс молекулы), потенциальная энергия молекулы mgx . Полная энергия молекулы $E = p^2/(2m) + mgx$. Тогда линии постоянства полной энергии – параболы относительно оси Ox будут иметь вид, изображенный на рисунке 6.1, а в качестве элементов фазового пространства удобно выбрать элементы с площадью $dp dx$. При абсолютно упругом столкновении двух молекул (без потерь энергии) изображающие их точки перейдут с одной параболы на другую с сохранением

полной энергии. Аналогию можно провести на любое M -мерное пространство.

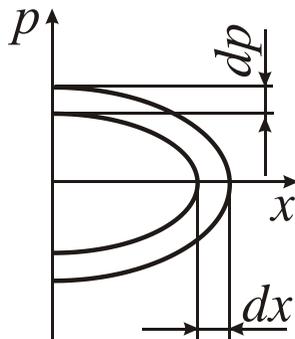


Рисунок 6.1- Изоэнергетические кривые

В отличие от классической в квантовой статистике одному состоянию системы соответствует не точка, а некоторый малый объем *фазового пространства* (иногда называемого μ -пространством). Это становится понятным, если вспомнить, что в классической физике все величины имеют сплошной, а в квантовой физике могут иметь и дискретный спектр значений с учетом соотношений неопределенностей Гейзенберга–Бора.

В физических системах в зависимости от условий могут проявляться не все особенности квантовых коллективов (частиц). В одних случаях может проявляться дискретность некоторых параметров, в других добавляется еще неразличимость частиц и принцип Паули, обусловленный взаимодействием частиц. Кроме того, коллективы могут быть вырожденными или невырожденными. Невырожденными называются коллективы, в которых число частиц много меньше, чем число возможных энергетических состояний. Вырожденными называются коллективы, в которых число частиц сравнимо по величине или больше, чем число возможных энергетических состояний. Это накладывает определенное ограничение на квантовые коллективы: бозоны могут находиться в одинаковом состоянии, причем, чем их больше, тем легче они в него заходят (как люди охотно заходят в веселую компанию), а даже два фермиона не могут ужиться, как скандальные соседи. В связи с этим для определения степени вырождения в квантовых коллективах необходимо знать число частиц в коллективе N и функцию $g(E)$ – число возможных состояний частицы с энергией E , кратность вырождения. Вырожденность можно определить и

по-другому. Газ частиц считается вырожденным, если его свойства отличаются от свойств классического идеального газа. Основным признаком вырождения газа является независимость энергии его частиц от температуры. Например, (фермионный) газ электронов в металле остается вырожденным до тех пор, пока любой из электронов не сможет обмениваться энергией с кристаллической решеткой. Это возможно лишь в том случае, если средняя энергия тепловых колебаний (или виртуальных частиц – фононов – квантов колебаний кристаллической решетки) не меньше энергии Ферми $k_B T \geq E_F$ (k_B – постоянная Больцмана). Тогда *температура Ферми* – температура перехода газа из невырожденного состояния в вырожденное $T_F \geq E_F / k_B$.

В силу вышесказанного в зависимости от обстоятельств системы описываются одной из трех статистик:

1) классическая Максвелла–Больцмана: частицы считаются различимыми, энергия может иметь как сплошной, так и непрерывный спектр; статистика основана на принципе Больцмана, согласно которому равновесному состоянию системы соответствует максимальная энтропия;

2) квантовая Бозе–Эйнштейна: для бозонов – частиц с целым и нулевым спином, частицы считаются неразличимыми, энергия имеет дискретный спектр значений;

3) квантовая Ферми–Дирака: для фермионов – частиц с полуцелым спином, частицы считаются неразличимыми, энергия имеет дискретный спектр значений.

Еще раз напомним, что в отличие от классической в квантовой статистике одному состоянию системы соответствует не точка, а некоторый малый объем фазового пространства – *ячейки*.

При решении многих практически важных задач необходимо знать функцию распределения, которая характеризует плотность вероятности распределения частиц статистической системы по пространству или вероятность распределения по квантово-механическим состояниям с определенными энергиями. Так как *функция распределения* связана с вероятностью, то она должна быть всегда *однозначна* (вероятность не может иметь несколько значений для данного значения какого-то параметра), **конечна** (вероятность конечное число). Кроме того, вероятность того, что частица имеет какую-то энергию или другой параметр a в интервале значений $(-\infty; +\infty)$, равна единице (событие достовер-

ное), поэтому $\int_{-\infty}^{+\infty} f(a) da = 1$ – так называемое *условие нормировки*.

Без вывода приведем выражения функций распределения (функций заполнения ячеек фазового пространства) или средней заполненности частицами состояний с определенной энергией E_i при температуре T

$$f(E_i) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} + \delta}, \quad (6.3)$$

где μ – химический потенциал (при $T=0$ К эта величина определяется как уровень Ферми) – это изменение энергии системы в изохорно-изоэнтропийном процессе при изменении числа частиц системы на одну частицу;

δ – постоянная: при $\delta = 0$ формула (6.3) дает нам функцию распределения Максвелла–Больцмана, при $\delta = -1$ – функцию распределения Бозе–Эйнштейна для бозонов, при $\delta = +1$ – функцию распределения Ферми–Дирака для фермионов.

6.2 Применение квантовых статистик к описанию системы частиц. Химпотенциал. Бозе-конденсация. Энергия Ферми

Строгое рассмотрение вопроса проводится в квантовой статистической физике. Здесь же мы используем некоторые упрощения. Например, в формулах отсутствуют множители, обусловленные наличием спина у частиц, и т.п., что, в принципе, не делает приведенный материал ошибочным, а лишь ограничивает его применение частными случаями. Материал призван лишь ознакомить с основными принципами квантовой статистики. Для более глубокого изучения квантовой и статистической физики авторы рекомендуют обратиться к известным классическим учебникам таких авторов, как Л.Д.Ландау, И.Е.Лифшиц или Ю.Б. Румер, М.Ш.Рывкин.

Рассмотрим применение квантовой статистики Бозе–Эйнштейна к невырожденной системе частиц с целым или нулевым спином. Такими частицами являются бозоны: фотоны, фоно-

ны, π -мезоны, а также атомы, в которых число электронов и нуклонов является четным. Такую систему можно рассматривать как бозе-газ, описываемый функцией распределения вида (6.3)

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}. \quad (6.4)$$

В общем случае число всех частиц с энергией E в единице объема газа (концентрация) определяется условием

$$n = \int f(E) dN(E), \quad (6.5)$$

где $dN(E)$ – число возможных состояний частицы с энергией в интервале $[E, E+dE]$ в единице объема конфигураций;

$\lambda(E)$ – плотность вероятности нахождения частицы в состоянии с энергией E .

Элемент объема пространства импульсов (шаровый слой), соответствующий модулю импульса в интервале $[p, p+dp]$ равен

$4\pi p^2 dp$. Обозначив через $V=1$ м³ элемент объема пространства конфигураций, получим элемент объема фазового пространства

$4\pi p^2 V dp$. Знаем, что минимальный объем ячейки фазового пространства, соответствующего одному, данному состоянию частицы с импульсом p определяется формулой (6.2). Тогда, разделив элемент объема фазового пространства

$4\pi p^2 V dp = 4\pi p^2 dp$ на $(2\pi\hbar)^3$, можно получить число возможных состояний частицы с импульсом в интервале $[p, p+dp]$ в единице объема конфигураций

$$dN(p) = \frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \quad (6.6)$$

или число состояний частицы с энергией в интервале $[E, E+dE]$ в единице объема конфигураций с учетом $p = \sqrt{2mE}$ и

$$dp = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m}{E}} dE$$

$$dN(E) = \frac{4\pi\sqrt{2} \cdot 2mEVm^{1/2} \frac{E^{-1/2}}{2} dE}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{m^{3/2} E^{1/2} dE}{\pi^2 \sqrt{2}\hbar^3}. \quad (6.7)$$

Подставляя выражения (6.4) и (6.7) в формулу (6.5), получаем

$$n = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{E} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}. \quad (6.8)$$

Из формулы (6.8) можно найти значение химпотенциала μ . Условие (6.8) может выполняться только при отрицательных значениях μ . Если предположить $\mu > 0$, то подынтегральное выражение будет отрицательным, что невозможно, так как функция распределения по смыслу связана с вероятностью и должна быть неотрицательной. Таким образом, $\mu \leq 0$. В связи с этим производные всегда отрицательны $\partial\mu/\partial T < 0$, т.е. можно сказать, что химпотенциал μ растет с уменьшением температуры T , все время оставаясь отрицательной величиной. Химпотенциал μ обращается в нуль при некоторой температуре $T_0 \neq 0$ K. Обратившись в нуль при T_0 величина $\mu = 0$ и при более низких температурах.

Чтобы выполнялось равенство (6.8), необходимо также предположить, что число частиц в системе уменьшается с уменьшением температуры, что, в свою очередь, невозможно, так как уйти из системы частицы не могут. Поэтому для выполнения равенства (6.8) частицы должны перейти на уровень с нулевой энергией, то есть при $T \leq T_0$ часть частиц должна находиться на уровне с нулевой энергией, а остальные будут распределены по другим уровням. Описанное явление называется бозе-

конденсацией, при абсолютном нуле температуры все частицы бозе-газа будут находиться на нулевом уровне. В этом проявляется одно из свойств бозе-газа.

Оценка температуры конденсации показывает, что при этой температуре все вещества находятся либо в твердом, либо в жидком состояниях, то есть не являются газами, что подтверждается экспериментами. Например, для гелия He при $T \leq 2,19$ К наблюдается своеобразное изменение состояния этого бозе-газа. Жидкий гелий состоит при этом из двух компонент: несконденсированной и сконденсированной (сверхтекучей) частей бозе-газа. Обнаружение явления сверхтекучести рассматривается в качестве экспериментального подтверждения теории конденсации бозе-газа. По аналогии рассматривается и явление сверхпроводимости, когда при температурах, близких к абсолютному нулю, образуются бозоны – пары взаимосвязанных электронов – куперовские пары. К данному газу также применима теория бозе-конденсации.

Рассмотрим другие свойства бозе-газа. С учетом формулы (6.8) имеем

$$E = \int_0^{\infty} E f(E) dN(E) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^{\infty} \frac{E^{3/2} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}. \quad (6.9)$$

Из курса общей физики известно, что давление и энергия в единице объема связаны соотношением $P = 2NE / (3V)$ (у нас объем единичный $V=1$ м³), тогда

$$P = \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{E^{3/2} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}. \quad (6.10)$$

Покажем, что при выполнении условий

$$\begin{cases} \frac{\mu}{k_B T} \ll 1, \\ E \gg \mu \end{cases} \quad (6.11)$$

Уравнение (6.10) переходит в уравнение Клапейрона-Менделеева, описывающего состояние идеального газа. Для этого воспользуемся малостью величины $\exp[\mu / (k_B T)] \ll 1$.

Обозначим $E / (k_B T) = x$ с учетом табличного интеграла

$$\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-\alpha x} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \alpha^{-3/2}, \text{ получим}$$

$$\begin{aligned}
 P &= \frac{\sqrt{2} m^{3/2} (k_B T)^{5/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-x}}{1 - \underbrace{e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-x}}_{\approx 0}} dx = \\
 &= \frac{\sqrt{2} m^{3/2} (k_B T)^{5/2}}{3\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \underbrace{\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx}_{=3\sqrt{\pi}/4} = \frac{m^{3/2} (k_B T)^{5/2}}{2\sqrt{2}\pi^{3/2} \hbar^3} e^{\frac{\mu}{k_B T}}. \quad (6.12)
 \end{aligned}$$

С учетом формулы (6.8) уравнение (6.12) должно принять вид уравнения Клапейрона-Менделеева. Для этого необходимо выполнить ряд преобразований. Во-первых, привести формулу (6.8) с учетом замены $E/(k_B T) = x$ и табличного интеграла

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} \sqrt{x} e^{-\alpha x} dx &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-3/2} \text{ к виду} \\
 n &= \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1} = \frac{m^{3/2} (k_B T)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{\underbrace{e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-x}}_{\approx 0} - 1} = \\
 &= \frac{m^{3/2} (k_B T)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-x} dx}{1 - \underbrace{e^{\frac{\mu}{k_B T}} e^{-x}}_{\approx 0}} = \frac{m^{3/2} (k_B T)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} e^{\frac{\mu}{k_B T}} \underbrace{\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx}_{=\sqrt{\pi}/2} = \\
 &= \frac{m^{3/2} (k_B T)^{3/2}}{2\sqrt{2}\pi^{3/2} \hbar^3} e^{\frac{\mu}{k_B T}}. \quad (6.13)
 \end{aligned}$$

Сравнивая формулы (6.13) и (6.12), можно записать уравнение Клапейрона - Менделеева в виде

$$P = nk_B T \quad (6.14)$$

или для произвольного числа молей в более привычном виде

$$PV = \frac{m}{M} RT. \quad (6.15)$$

Таким образом, при выполнении условий (6.11) (энергия частицы много больше химпотенциала) квантовая статистика Бозе-Эйнштейна переходит в классическую статистику Максвелла-Больцмана. При этом возможно получение уравнений классической физики из более общих – квантовых – уравнений.

По аналогии с проведенным выше рассмотрением для бозе-газа рассмотрим применение квантовой статистики Ферми-Дирака к системе частиц с полужелым спином с учетом принципа запрета Паули. Такими частицами являются фермионы: электроны, μ -мезоны, нуклоны, а также атомы, в которых число электронов и нуклонов является нечетным. Такую систему можно рассматривать как ферми-газ, описываемый функцией распределения вида (6.3)

$$f(E) = \frac{1}{\frac{E - \mu}{e^{k_B T}} + 1}. \quad (6.16)$$

Рассматривая невзаимодействующие частицы в пространстве импульсов, для числа состояний с энергией в интервале $[E; E + dE]$ в единице объема конфигураций (в нашем случае, напомним, объем единичный, $V=1 \text{ м}^3$) можно по аналогии с выводом формулы (6.7) получить

$$dN(E) = \frac{2m^{3/2} E^{1/2} dE}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}}. \quad (6.17)$$

Множитель «2» перед формулой записан с учетом того, что

в состоянии с одинаковой энергией могут находиться только два фермиона с противоположными спинами ($g(E)=2$ согласно принципу запрета Паули).

При рассмотрении свойств ферми-газа интерес представляет график зависимости функции распределения Ферми–Дирака от термодинамической температуры и энергии, изображенный на рисунке 6.2

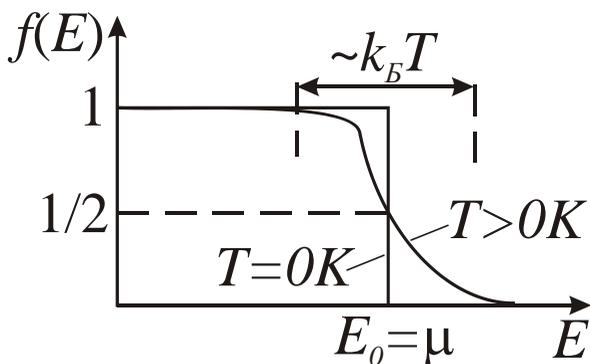


Рисунок 6.2 - График зависимости функции распределения Ферми–Дирака от термодинамической температуры и энергии

Отметим несколько ключевых моментов:

1) при $\mu/(k_B T) \gg 1$ (тогда $\exp[-\mu/(k_B T)] \approx 0$) и $E=0$

$$\Rightarrow f(E) = \frac{1}{\exp\left[\frac{E - \mu}{k_B T}\right] + 1} \approx 1; \text{ это означает, что по}$$

ка энергия E много меньше химпотенциала μ ($E \ll \mu$), функция распределения $f(E) \approx 1$;

$$2) \text{ при } E = \mu \text{ имеем } f(E) = \frac{1}{\exp[0] + 1} = \frac{1}{2}.$$

В данном случае следует рассказать о таком понятии, как энергия Ферми. При $T=0$ К электроны в металле заполняют энергетические уровни, верхний из них и обладает энергией Ферми. Энергия Ферми – это максимально большая энергия,

Основы квантовой механики и ее приложения

которой обладает электрон в кристалле при температуре 0 К. С точки зрения статистической физики $f(E)=1/2$ означает, что вероятность заполнения энергетического уровня с энергией Ферми $E_F = \mu$ при любой температуре равна 1/2.

3) с дальнейшим ростом энергии E функция распределения $f(E)$ убывает и при $E \gg \mu \gg k_B T$ убывание это становится близким к обычному экспоненциальному

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left[\frac{E - \mu}{k_B T}\right] + 1} \approx \exp\left[-\frac{\mu - E}{k_B T}\right] \quad (\text{получаем})$$

функцию распределения Максвелла–Больцмана).

Функция распределения Ферми–Дирака для $T=0$ К и $T>0$ К заметно отличается лишь в небольшой области энергий порядка $k_B T$.

ГЛАВА 7. ОСНОВЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА (ЧАСТЬ II)

7.1 Теплоемкость твердых тел. Электронный газ в металлах. Понятие о квантовой теории электро- и теплопроводности металлов. Явление сверхпроводимости

В 1819 году французские физики П.Л. Дюлонг (1785–1838) и А.Т. Пти (1791–1820) экспериментально установили закон, согласно которому молярная теплоемкость (в отличие от удельной) химически простого одноатомного вещества при больших температурах (комнатная и выше) равна $3R$, где $R=8,31$ Дж/(моль·К) – универсальная газовая постоянная

$$C_V = 3R \approx 25 \text{ Дж/(моль·К)}. \quad (7.1)$$

Формула (7.1) называется *законом Дюлонга–Пти*.

Для молярной теплоемкости органических соединений справедлив *закон Неймана–Коппа* (1864 г.), согласно которому

$$C_V = 3nR, \quad (7.2)$$

где n – число атомов в соединении.

Закон Дюлонга–Пти достаточно легко объясним с помощью классической физики. Например, в 1 моле вещества содержится N_A частиц, данному твердому телу (ТТ) можно поставить в соответствие $3N_A$ гармонических осцилляторов (три взаимно-перпендикулярных направления колебаний – три степени свободы). Тогда энергия теплового движения $E = 3N_A \langle \mathcal{E} \rangle$, где $\langle \mathcal{E} \rangle$ – средняя энергия одного осциллятора. В классической физике энергия считается равномерно распределенной по степеням свободы, каждой степени свободы соответствует энергия $k_B T/2$. Энергия гармонического осциллятора складывается из примерно равных потенциальной и кинетической энергий, т.е. $\langle \mathcal{E} \rangle = k_B T$. Тогда $E = 3N_A k_B T = RT$, а по определению теплоемкости

$$C_V = \left(dE / dT \right)_V \quad (7.3)$$

легко получаем формулу (7.1).

Закон (7.2) справедлив в отсутствие свободных электронов в ТТ, т.е. когда ТТ является диэлектриком. В металлах в тепловом движении участвуют не только атомы (колебательное движение), но и электроны (поступательное движение). Свободные электроны имеют 3 степени свободы, т.е. средняя энергия электрона равна $3k_B T/2$. Если валентность атома Z , то полная энергия теп-

лового движения для 1 моля металла складывается из двух слагаемых: первое выражает энергию осцилляторов–атомов в узлах кристаллической решетки, а второе выражает энергию электронного газа в металле

$$E = 3N_A k_B T + 3ZN_A k_B T / 2 = 3RN_A (1 + Z/2). \quad (7.4)$$

По определению теплоемкости (7.3) даже для одновалентного металла ($Z=1$) молярная теплоемкость $C_V = 4,5R$, что в 1,5 раза больше опытной, выражаемой формулой (7.2). Данная ситуация получила название «катастрофа с теплоемкостью». Вклад электронов в теплоемкость классическая теория объяснить не смогла, ее выводы ограниченно применимы. Делалась попытка объяснить участие электронов в формирование теплоемкости в теории А.Эйнштейна (1907 г.), а затем П.Дебая (1912 г.). Теория Эйнштейна не дала согласия с опытом в области низких температур, зависимость $C_V(T)$ представлена на рисунке 7.1, данные теории Эйнштейна – пунктир, опыт – сплошная линия)

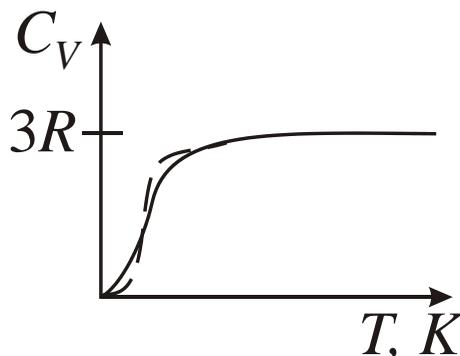


Рисунок 7.1 – График зависимости $C_V(T)$

Теория Дебая, также являясь из-за ряда допущений приближенной, при расчете на ЭВМ дает достаточно хорошее согласие с опытом практически для всех температур. Дальнейшее рассмотрение для спорного случая – для низких температур будем проводить согласно теории П.Дебая.

Фононом называется элементарная порция (квант) звуковой энергии с частотой ω и энергией $\varepsilon = \hbar\omega$, подобно тому, как фотон – квант электромагнитного излучения. И фонон, и фотон являются бозонами. Это означает, что все соотношения, полученные в предыдущей лекции для фотонов, останутся верными и для фононов. Звуковые фононы полностью аналогичны фотонам, ибо и те, и другие описываются одним и тем же законом дисперсии:

для фотонов $\omega = ck$, а для звуковых фононов $\omega = sk$, где k – волновое число, c – скорость света в вакууме, s – скорость звука. Степень вырождения (состояния) у фотонов 2 (два взаимно-перпендикулярных направления поляризации), а у фонона 3 (в твердом теле (ТТ) звуковые волны могут быть продольными и поперечными, причем имеются две независимые поперечные поляризации). Фотоны могут иметь любую частоту от 0 до ∞ , а фононы имеют верхнее ограничение.

Используя формулу (6.22) с заменой $\hbar = h/(2\pi)$, скорости света c на среднюю скорость звука s , v на $\omega = 2\pi v$, для энергии единицы объема кристалла при заданной температуре T получим

$$\frac{E}{V} = \frac{3\hbar}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1 \right)}. \quad (7.5)$$

Вычисляя интеграл (7.5) аналогично интегралу (6.22), см. переход к формуле (6.23), для энергии единичного объема имеем

$$E = \frac{\pi^2 k_B^4}{10\hbar^3 s^3} T^4. \quad (7.6)$$

По определению теплоемкости (7.3)

$$C_V = dE/dT = \frac{2\pi^2 k_B^4}{5\hbar^3 s^3} T^3. \quad (7.7)$$

Формула (7.3) называется законом Дебая для низкотемпературной теплоемкости, согласно ей $C_V \sim T^3$, что для низких температур согласуется с опытом (рис. 7.1).

В теории Дебая вводится понятие характеристической температуры Дебая, соответствующей максимальной частоте колеба-

ний атомов в узлах кристаллической решетки и, следовательно, максимальной энергии фононов:

$$\Theta_D = (\hbar\omega_{\max}) / k_B = \left(\frac{6\pi^2 N_A s^3 \hbar^3}{V k_B^3} \right)^{1/3}. \quad (7.8)$$

Интеграл энергии (7.5) в теории Дебая с помощью замен $\hbar\omega / (k_B T) = x \Rightarrow \omega = k_B T x / \hbar$, $d\omega = k_B T dx / \hbar$, $x_{\max} = \hbar\omega_{\max} / (k_B T)$, $\Theta_D = (\hbar\omega_{\max}) / k_B$ приводится к виду

$$\begin{aligned} E &= \frac{3V\hbar}{2\pi^2 s^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1 \right)} = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 s^3} \cdot \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^4 \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \\ &= \frac{N_A k_B}{N_A} \frac{9k_B^3}{6\pi^2 s^3 \hbar^3} T^4 \int_0^{x_{\max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 9RT \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \\ &= 3RT \cdot D(T / \Theta_D). \end{aligned} \quad (7.9)$$

Именно в формуле (7.9) и задается характеристическая температура Дебая, выражаемая формулой (7.8), а функция

$$D(T / \Theta_D) = 3 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} =, \quad (7.10)$$

которую нельзя вычислить аналитически (ее значения вычисляются численными методами и приводятся обычно в таблицах), называется *функцией Дебая*.

При высоких температурах, когда $\hbar\omega \ll (k_B T)$ или $T \gg \Theta_D$, с учетом $\hbar\omega / (k_B T) = x \ll 1$

$\Rightarrow e^x - 1 \approx (1 + x) - 1 = x$ для функции Дебая получаем

$$D(T / \Theta_D) = 3 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3 dx}{x} = 3 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^3 = 1,$$

т.е. согласно определению (7.3) и формуле (7.9), $C_V = (dE/dT)_V = 3R$, что согласуется с опытом.

В случае низких температур по теории Дебая, когда $\hbar\omega \gg (k_B T)$ или $T \ll \Theta_D$, с учетом табличного инте-

грала $\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$ молярная теплоемкость согласно

формуле (7.7) $\sim T^3$, что также согласуется с опытом.

Результаты теории плохо согласуются с опытом при $T = \Theta_D$ из-за взятой П.Дебаем упрощенной – линейной – зависимости ω от волнового числа (вектора). Однако при подстановке в формулы Дебая данной реальной – нелинейной – зависимости расчет с помощью ЭВМ также приводит к верным результатам, согласующимся с опытом.

Неудача описания явления теплопроводности металлов также обусловлена либо неучетом электронного газа в металлах в классической – газокINETической – физике, либо неверное рассмотрение поведения этого газа. Например, в классической электро- и теплопроводности металлов теории П.Друде предполагается одновременность столкновений свободных электронов с ионами решетки. В более поздней теории Лоренца последовал отказ от одновременности столкновений, но не было учета поведения электронов как фермионов, т.е. того, что сейчас мы знаем, как принцип запрета В.Паули. Учет этого принципа вкупе с применением функции распределения электронов по энергиям (правда, равновесной функции распределения) в теории (1927г.) немецкого физика и математика А.Зоммерфельда (1868–1951) привел к результатам, согласующимся с опытом.

В классической теории Лоренца соответственно для удель-

ных теплопроводности и проводимости получают выражения

$$\chi = \frac{3 k_B^2 \pi}{2 m_e} \cdot T = \frac{1}{3} C_V v^2 \tau, \quad (7.11)$$

$$\gamma = \frac{ne^2 \tau}{m_e}, \quad (7.12)$$

где k_B – постоянная Больцмана,
 τ – среднее время пробега между двумя последовательными столкновениями;
 n – концентрация электронов;
 m_e – масса электронов;
 T – температура;
 C_V – теплоемкость;
 v – средняя скорость электронов;
 e – модуль заряда электрона.

В квантовой теории А.Зоммерфельда при учете поведения (вклада) электронного газа получаются следующие соответствующие выражения

$$\chi = \frac{\pi^2 k_B^2 \pi}{3 m_e} \cdot T, \quad (7.13)$$

$$\gamma = \frac{ne^2 \tau}{2m_e}. \quad (7.14)$$

Видно, что формулы (7.12) и (7.14) совпадают по виду, но получены при кардинально различающихся подходах.

Согласно классической теории электро- и теплопроводности металлов носителями тока и теплоты (высокая теплопроводность металлов) являются свободные электроны. Г.Видеманом (1826–1899) и Францем в 1853 г. экспериментально установлено, что отношение теплопроводности χ к удельной проводимости γ при данной температуре T есть величина постоянная – *закон Видемана–Франца*:

$$\chi / \gamma = L \cdot T. \quad (7.15)$$

$L = const$ – число Лоренца, по теории Лоренца $L = 3(k_B / e)^2 = 2.23 \cdot 10^{-8} \text{ Дж}^2/\text{К}^2 \cdot \text{Кл}^2 = (\text{Вт} \cdot \text{Ом})/\text{К}^2$, а по теории Зоммерфельда $L = \pi^2 (k_B / e)^2 / 3 = 2.44 \cdot 10^{-8} \text{ Дж}^2/\text{К}^2 \cdot \text{Кл}^2 = (\text{Вт} \cdot \text{Ом})/\text{К}^2$, что лучше (полностью) согласуется с опытом.

7.2 Решение уравнения Э.Шредингера для твердого тела. Понятие о зонной теории твердых тел. Металлы, полупроводники и диэлектрики. Их электрические свойства

Известно, что твердое тело (ТТ) состоит из атомов, т.е. из ядер атомов и электронов. Ядра занимают положение, совпадающее с положением узлов кристаллической решётки, и совершают малые колебания у данного положения равновесия. Силы взаимодействия между ядрами велики, поэтому внешние силы для деформации кристалла должны быть значительны. Слабее всего с ядрами связаны внешние – валентные электроны, поэтому под действием внешнего поля (по большей части) они могут двигаться поступательно и участвовать в формировании электрического тока.

Для количественной характеристики данного процесса необходимо решать уравнение Шредингера (УШ) для системы очень большого числа частиц (вспомним $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$), что в настоящее время напрямую невозможно (даже для системы трёх взаимодействующих частей решение УШ сложно).

Поэтому для решения УШ для ТТ используют различные приближения:

$$\begin{aligned}
 \hat{H}\Psi &= E\Psi \equiv \\
 \equiv & \left[\underbrace{\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i\right)}_{\text{Кинетическая энергия электронов}} + \underbrace{\sum_k \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{я}}}\Delta_k\right)}_{\text{Кинетическая энергия ядер}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}}_{\text{Энергия взаимодействия электронов (} i \neq j \text{)}} +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \underbrace{V_z(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)}_{\substack{\text{Энергия} \\ \text{взаимодействия} \\ \text{ядер}}} + \underbrace{U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)}_{\substack{\text{Энергия} \\ \text{взаимодействия} \\ \text{ядер} \\ c \\ \text{электронами}}}] \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N) = \\
 & = E \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N). \quad (7.16)
 \end{aligned}$$

1. Так как масса ядер $m_{\text{я}} \gg m_e$ и ядра в основном колеблются около положения равновесия, а электроны движутся в основном поступательно, то скорость $V_{\text{я}} \ll V_{\text{эл}}$, что при малых смещениях ядер приводит к быстрому перераспределению электронов. Отсюда можно утверждать, что изменение энергий и волновых функций электронов происходит практически без энергообмена с ядрами. Данное приближение называется *адиабатическим (приближение Борна–Оппенгеймера)*: электроны движутся в поле практически фиксированных ядер, при этом координаты ядер входят как параметры в выражения для E и Ψ электронов (а не как переменные).

Самое грубое адиабатическое приближение – когда ядра неподвижны, их кинетическая энергия равна нулю, т.е. электроны движутся в постоянном периодическом поле ядер, при этом энергия взаимодействия ядер между собой будет константой (V_0). Соответствующим подбором нулевого уровня можно добиться того, что $V_0 = 0$, тогда в уравнении (7.16) останутся только первое, третье, и пятое слагаемые.

2. Ещё одним приближением, упрощающим решение УШ для ТТ, является *приближение самосогласованного поля (Хартри–Фока)*: поле всех электронов, определяющее движение каждого электрона, в свою очередь, определяется и им. В данном приближении третье слагаемое в уравнении (7.16) будет иметь вид суммы функций

$$\sum_i W_i(\vec{r}_i). \quad (7.17)$$

Пятое слагаемое в уравнении (7.16) также можно упро-

стить, представив в виде суммы энергий взаимодействия каждого электрона с полем всех ядер, являющимся для электронов определяющим (электроны же практически не влияют на ядра):

$$\sum_i U_i(\vec{r}_i). \quad (7.18)$$

Таким образом, УШ с учётом (7.17) и (7.18) можно переписать в виде:

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i + W_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i) \right) \right] \Psi = E\Psi$$

или в операторной форме

$$\hat{H}\Psi = \sum_i \hat{H}_i \Psi = E\Psi$$

В квантовой механике (КМ) показывается, что если $\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i$, то $\Psi = \prod_i \Psi_i$, а $E = \sum_i E_i$, тогда, вводя обозначение для произведения $\prod_i \Psi_{i(j)}$ (все, кроме Ψ_j),

можем записать

$$\prod_i \Psi_{i(1)} \hat{H}_1 \Psi_1 + \dots + \prod_i \Psi_{i(n)} \hat{H}_n \Psi_n = (E_1 + E_2 + \dots + E_n) \prod_i \Psi_i$$

При делении обеих частей на $\prod_i \Psi_i$, получим

$$\frac{\hat{H}_1 \Psi_1}{\Psi_1} + \dots + \frac{\hat{H}_n \Psi_n}{\Psi_n} = E_1 + \dots + E_n. \quad (7.19)$$

Уравнение (7.19) представляет собой систему уравнений

$$\frac{\hat{H}_1 \Psi_1}{\Psi_1} = E_i \quad \text{или} \quad \hat{H}_i \Psi_i = E_i \Psi_i \quad \text{для каждого электрона,}$$

\hat{H}_i , Ψ_i , E_i зависят только от состояния данного электрона и не зависят от состояния других электронов, т.е. можно записать без индексов

$$\hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V(\vec{r})\right)\Psi = E\Psi. \quad (7.20)$$

Трудности решения уравнения (7.20) заключается в определении вида функции $V(\vec{r})$. Используются различные приближения, т.к. вид $V(\vec{r})$ строго не определяется ни теоретически, ни практически.

Данные приближения: метод псевдопотенциалов, метод плоских волн, метод функции Грина и так далее, однако качественные результаты (без ЭВМ) можно получить уже в приближении для функции $V(\vec{r})$ в уравнении (7.20), называемом *моделью Кронига – Пенни*: функция $V(\vec{r})$ представляет собой набор чередующихся потенциальных ям шириной a и потенциальных барьеров шириной b и высотой V_0 :

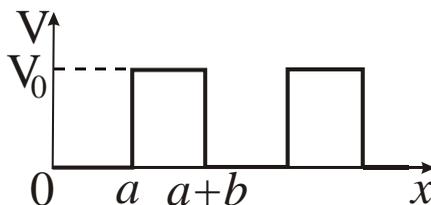


Рисунок 7.2 - Модель Кронига-Пенни

Тогда в одномерном случае движения электронов (вдоль оси Ox) УШ будет иметь вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi. \quad (7.21)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0, n(a+b) < x < a + n(a+b), \\ V_0, a + n(a+b) < x < (n+1)(a+b). \end{cases} \quad (7.22)$$

Ранее уже указывались требования, налагаемые на ВФ частиц. Однако для электрона в кристалле необходимо учитывать

ещё и пространственную периодичность, т.е. учитывать особенности строения кристалла.

В каждом кристалле можно выделить малую область, содержащую все особенности строения (симметрии) данного кристаллического вещества. При перемещении на некоторое расстояние (индивидуальное для каждого вещества) – *трансляции* – этой *элементарной ячейки* можно получить весь кристалл целиком (в идеале без дефектов).

Если \vec{R}_T – вектор трансляции, то свойства электрона должны быть одинаковыми при его координате \vec{r} и $\vec{r} + \vec{R}_T$, т.е.

$$|\Psi(\vec{r})|^2 = |\Psi(\vec{r} + \vec{R}_T)|^2.$$

Это возможно (так как потенциальная энергия электрона в кристалле в силу периодичности $U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}_T)$), если эти две функции отличаются на постоянный множитель C , $C\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{R}_T)$, причём $|C|^2 = 1$ (из условия нормировки).

Данным условиям удовлетворяют функции вида

$$\Psi(\vec{r} + \vec{R}_T) = e^{i\vec{k}\vec{R}_T} \Psi(\vec{r})$$

$$\text{или } \Psi_k(\vec{r}) = \varphi_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (7.23)$$

Функции (15.23) – *функции Ф.Блоха (волны Блоха)*. *Теорема Блоха*: ВФ электрона в кристалле представляет собой плоскую бегущую волну, модулированную по амплитуде периодической функцией $\varphi_k(\vec{r})$, имеющей период решётки.

Таким образом, решение (7.22) будем искать в виде функций Блоха (7.23). Тогда

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \varphi(x)e^{ikx}, \\ \Psi''(x) &= (\varphi'(x)e^{ikx} + \varphi(x)ike^{ikx})' = \\ &= \varphi''(x)e^{ikx} + \varphi'(x)ike^{ikx} + \varphi'(x)ike^{ikx} - k^2\varphi(x)e^{ikx}. \end{aligned}$$

Подставляя все это в (15.22) и деля обе части на e^{ikx} , получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\varphi'' + 2ikx\varphi' - k^2\varphi) + V(x)\varphi = E\varphi.$$

При нахождении электрона в ПЯ (см. систему (7.21)):

$$\varphi'' + 2ik\varphi' - (k^2 - \frac{2mE}{\hbar^2})\varphi = 0, \quad (7.24)$$

$$\varphi'' + 2ik\varphi' - (k^2 - \alpha^2) = 0,$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Если электрон находится в области барьеров (см. систему (7.21)):

$$\varphi'' + 2ik\varphi' - (k^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2mV_0}{\hbar^2})\varphi = 0, \quad (7.25)$$

$$\varphi'' + 2ik\varphi' - (k^2 + \beta^2) = 0,$$

$$\beta = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}(V_0 - E)}.$$

Для схожести с формулой (7.24) запишем (7.26) в виде

$$\varphi'' + 2ik\varphi' - (k^2 - (i\beta)^2)\varphi = 0. \quad (7.26)$$

Решения для уравнений (7.24) и (7.26) соответственно будем искать в виде

$$\varphi_1 = Ae^{-i(k+\alpha)x} + Be^{-i(k-\alpha)x}, \quad (7.27)$$

$$\varphi_2 = Ce^{-i(k+i\beta)x} + De^{-i(k-i\beta)x}. \quad (7.28)$$

Для определения констант A, B, C, D используем налагаемые на ВФ условия её непрерывности и непрерывности её производных на границе смежных областей (яма-барьер):

$$\begin{cases} \varphi_1 = \varphi_2 \\ \varphi_1' = \varphi_2' \end{cases}$$

$$x = n(a + b),$$

при

$$x = a + n(a + b). \quad (7.29)$$

Подставив соотношения (7.27), (7.28) в (7.29), получаем систему из четырёх линейных однородных уравнений относительно коэффициентов A, B, C, D . Условием существования нетривиального решения системы является равенство нулю детерминанта (определителя), составленного из коэффициентов при искомым величинах A, B, C, D .

После преобразований получаем уравнение

$$\cos k(a + b) - \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \operatorname{sh}(\beta b) \sin(\alpha a) - \operatorname{ch}(\beta b) \cos(\alpha a) = 0 \quad (7.30)$$

$$\left(\operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \operatorname{ch} x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \right).$$

Решая уравнение (7.30) с учётом $\alpha = f(E)$, $\beta = f(E)$ и $k = f(\alpha, \beta) = f(E)$, можно получить представление об энергетическом спектре электрона в кристалле. Прямое решение уравнения (7.30) вызывает очень большие трудности, поэтому сделаем ряд упрощений, следуя Кронигу и Пенни. Рассмотрим очень тонкие ($b \rightarrow 0$) и высокие ($V_0 \rightarrow \infty$) барьеры, но при этом так, чтобы величина bV_0 была конечной. Это означает, что $\beta^2 \gg \alpha^2$, (так как $\beta^2 \sim V_0$, а $\alpha^2 \sim E$) $\beta \cdot b^2$ конечно, а $\beta b \rightarrow 0$.

При $b \rightarrow 0$ $\operatorname{ch} \beta b \rightarrow 1$, $\operatorname{sh} \beta b \rightarrow \beta b$.

Из курсов математики известно, что для малых x

$$shx = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \approx \frac{(1+x) - (1-x)}{2} = x, \quad (7.31)$$

$$chx = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \approx \frac{(1+x) + (1-x)}{2} = 1.$$

С учётом равенств (7.31) уравнение (7.30) примет вид

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \beta b \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos ka \quad (\text{при } b \rightarrow 0)$$

$$\text{или } \frac{\beta}{2\alpha} \beta b \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos ka,$$

$$\text{или } \underbrace{\frac{\beta^2 ab}{2}}_Q \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka).$$

(7.32)

Далее обозначим

$$Q = \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ \beta \rightarrow 0}} \frac{\beta^2 ab}{2}.$$

Данный параметр определяет эффективную площадь каждого барьера, а также степень его прозрачности для электрона, степень связанности электрона в потенциальной яме.

1. При $Q \rightarrow 0$ получаем *приближение слабой связи*, т.е. практически свободный электрон и из формулы (7.32) $\cos \alpha a = \cos ka$,

$$ka = \alpha a \Rightarrow k = \alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \text{ т.е. то}$$

же, что и для свободного электрона.

2. При $Q \rightarrow \infty$ получаем приближение сильной связи или бесконечно глубокой потенциальной ямы, для которой, как мы знаем,

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (7.33)$$

Равенство (7.33) можно получить из (7.32) при условии $\sin \alpha a = 0$, $\alpha a \neq 0$, $\alpha a = \pi n$, $n = 1, 2, \dots$,

$\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n^2}{a^2}, \dots$ (т.е. имеем дискретный спектр значений энергии).

Приближение 2 соответствует электрону, находящемуся на глубоких энергетических уровнях и поэтому слабо взаимодействующему с соседними атомами.

Данное приближение не соответствует валентным, наиболее слабо связанным с ядром электронам, которые будут взаимодействовать с соседними атомами. Нужна более строгая (зонная) теория. Поэтому для проведения качественного анализа необходимо наложить условие $Q \gg 1$ (должно быть большим, но конечным), но при этом αa должно слабо отличаться от πn (см. равенство (7.29)), т.е. должно быть

$$\alpha a = \pi n + \varphi, \quad \varphi \ll \pi n. \quad (7.34)$$

Подставим приближение (7.34) в формулу (7.32) с учётом разложения $\cos \alpha a$ и $\frac{\sin \alpha a}{\alpha a}$ в ряд Тэйлора, ограничиваясь первым линейным членом

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0):$$

$$x_0 = \pi n, \quad x = \pi n + \varphi \Rightarrow \Delta x = \varphi,$$

$$\cos \alpha a = \cos(\pi n + \varphi) = \cos \pi n - \sin \pi n \varphi = (-1)^n, \quad (7.35)$$

$$\frac{\sin \alpha a}{\alpha a} = \frac{\sin(\pi n)}{\pi n + \varphi} = \frac{\sin \pi n}{\pi n} + \frac{\cos(\pi n)\pi n - \overbrace{\sin(\pi n)}^{=0}}{(\pi n)^2} \varphi = \frac{(-1)^n \varphi}{\pi n} \quad (7.36)$$

Подставляя разложения (7.35) и (7.36) в формулу (7.32), получим

$$\frac{Q(-1)^n}{\pi n} \varphi + (-1)^n = \cos ka \quad \Bigg| \quad x(-1)^n,$$

$$\Rightarrow \frac{Q}{\pi n} \varphi + 1 = (-1)^n \cos ka$$

$$\varphi = \frac{\pi n}{Q} [(-1)^n \cos ka - 1]. \quad (7.37)$$

Подставляя выражение (7.37) в приближение (7.34)

$$\alpha a = \pi n + \frac{\pi n}{Q} [(-1)^n \cos ka - 1] = \pi n \left[1 - \frac{1}{Q} + \frac{(-1)^n \cos ka}{Q} \right],$$

и возводя обе части в квадрат, имеем

$$\alpha^2 a^2 = \pi^2 n^2 \left[1 + \underbrace{\frac{1}{Q^2}}_{\approx 0} + \frac{\cos^2 ka}{Q^2} - \frac{2}{Q} + \frac{2(-1)^n \cos ka}{Q} - \underbrace{\frac{2(-1)^n \cos ka}{Q^2}}_{\approx 0} \right] =$$

$$= \pi^2 n^2 \left[1 - \frac{2}{Q} + \frac{2(-1)^n \cos ka}{Q} \right]. \quad (7.38)$$

С учётом $\alpha^2 = 2mE/\hbar^2$ из уравнения (7.38) получаем приближенное выражение для энергии электрона в кристалле:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \left[1 - \frac{2}{Q} + \frac{2(-1)^n \cos ka}{Q} \right] =$$

$$= \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{ma^2 Q} + \frac{(-1)^n \hbar^2 \pi^2 n^2 \cos ka}{ma^2 Q} =$$

$$\begin{aligned}
 &= E_{(n)}^0 - \underbrace{C_n}_{=2E_n^0/Q} + \underbrace{(-1)^n C_n \cos ka}_{= \frac{(-1)^n E_n^0 2 \cos ka}{Q}}. \quad (7.39)
 \end{aligned}$$

E_n^0 – энергия электронов на n -м уровне изолированного атома; с образованием кристалла энергия электронов понижается (см. формулу (7.39)), что говорит о том, что образование кристалла энергетически выгодно. Последнее слагаемое определяет пределы изменения энергии электронов на n -ом уровне, т.е. определяет зонный характер энергетического спектра электрона в кристалле, $E=f(k)$.

Согласно более строгому рассмотрению в зонной теории, при сближении атомов для образования кристаллической решётки происходит расщепление дискретных уровней энергии электронов свободных атомов в зоны разрешенных значений энергии, которые разделены зонами запрещённых значений энергии. В пределах зон уровни разрешённых значений энергии располагаются очень близко (разность энергий $<0,1$ эВ), поэтому в пределах зоны энергетический спектр можно считать *квазинепрерывным*.

Верхнюю (последнюю) из заполненных разрешённых зон называют *валентной зоной (ВЗ)*, а следующую за ней зону запрещённых значений энергии – *запрещенной зоной (ЗЗ)*, а следующую свободную разрешённую – *зоной проводимости (ЗП)*.

Наиболее сильно расщепляются в зоны энергетические уровни валентных электронов свободных атомов (внешние электроны). Именно валентные (внешние) электроны в ВЗ определяют электропроводность, например, *металлов*, для которых не полностью заполненная ВЗ является и зоной проводимости. При наложении даже слабого электрического поля на кристалл электроны ВЗ могут ускоряться электрическим полем, приобретать дополнительную скорость, т.е. кинетическую энергию, и переходят на более высокие уровни энергии в ВЗ, которые в данном случае свободны.

Электроны ВЗ могут участвовать в электропроводности даже при абсолютном нуле. К *металлам (проводникам I рода)* относятся вещества, у которых ВЗ либо не полностью заполнена электронами (и является ЗП), либо полностью заполнена, но перекрывается с ЗП, т.е. *ширина ЗЗ $E_g=0$ (gap – англ. скачок, разрыв)*.

Полупроводниками являются кристаллы, у которых при абсолютном нуле температуры $T=0$ К ВЗ полностью заполнена электронами.

тронами, ЗП пуста, а ширина 33 $E_g \leq 3$ эВ. Название «полупроводники» связано с тем обстоятельством, что их удельная электропроводность при комнатных температурах имеет промежуточные значения между удельной электропроводностью металлов $\gamma \sim 10^6 - 10^8$ Ом·м⁻¹ и диэлектриков $\gamma \sim 10^{-10} - 10^{-8}$ Ом·м⁻¹. Характерной особенностью полупроводников является экспоненциальное возрастание $\gamma = f(T)$ от температуры:

$$\gamma = \gamma_0 e^{-\frac{E_g}{kT}},$$

в отличие от металлов, для которых γ уменьшается (удельное сопротивление $\rho = \rho_0(1 + \alpha t)$ растёт линейно с ростом температуры, $\alpha = 1/273,15$ град⁻¹).

Полупроводники делят на *прямозонные* (центральные максимумы ЗП и ВЗ друг против друга) и *не прямозонные* (максимумы смещены друг относительно друга) в силу нелинейной зависимости изменения E_c (дно ЗП), что изображено на рисунке 7.3, а, и E_v (потолок ВЗ), что изображено на рисунке 7.3, б

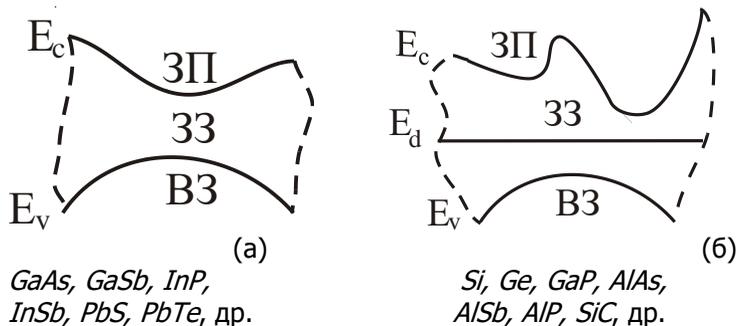


Рисунок 7.3 – Рельеф зонных границ для прямозонных (а) и непрязонных (б) полупроводников

Диэлектриками называются кристаллы, для которых выполняются условия для полупроводников, но $E_g \leq 2 - 3$ эВ. Электропроводность диэлектриков возможна только при температурах, больших температуры их плавления; в обычных условиях

Основы квантовой механики и ее приложения

диэлектрики электрический ток не проводят. Таким образом, *различие между металлами и диэлектриками качественное, а между полупроводниками и диэлектриками количественное.*

ГЛАВА 8. ПОЛУПРОВОДНИКИ, ИХ СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ

8.1 Собственная и примесная проводимость полупроводников. Эффект Ганна

Собственные полупроводники (СПП) – полупроводники (ПП) практически без примесей, содержащие примесей много меньше 1 %. В СПП при температуре, стремящейся к абсолютному нулю, отсутствуют свободные носители заряда. При повышении температуры электроны из ВЗ приобретают достаточную для перехода через запрещенную зону (ЗЗ) в зону проводимости (ЗП) энергию – в СПП появляются свободные носители заряда: электроны в ЗП и дырки (положительные заряды при отсутствии электрона) в валентной зоне (ВЗ). В СПП их обозначают соответственно n_i и p_i . Например, в роли СПП могут выступать чистые кремний Si , германий Ge . Данные элементарные ПП являются элементами четвёртой группы периодической таблицы Д.И.Менделеева, т.е. имеют на внешнем уровне 4 электрона, образующие в кристаллической решётке заполненные ковалентные связи.

При введении в СПП примесных атомов с большей на единицу (и более) валентностью (мышьяк As (V), фосфор P (V)) четыре электрона этого атома образуют ковалентные связи с четырьмя атомами кремния Si . Энергия связи пятого электрона оказывается сравнительно с ними малой и уже при температуре около 100 К такие электроны покидают примесные атомы – примесь полностью ионизирована – и становятся *электронами проводимости*. Так как концентрация электронов в данном случае больше, чем дырок, то ток создаётся в основном электронами, *проводимость называется электронной, донорной или n-типа*. *Примесный атом – донор* – становится положительным ионом и перемещаться по решётке не может. Концентрация электронов определяется концентрацией примесей, причём зависимость эта существенно нелинейная.

*С точки зрения зонной теории введение такой примеси искажает поле решётки, что приводит к возникновению в ЗЗ донорного энергетического уровня E_d вблизи дна ЗП E_c . $E_d \sim 0,01$ эВ, что меньше, чем тепловая энергия $kT \sim 0,025$ эВ уже при комнатной температуре $T_k = 300$ К, что изображено на рисунке 8.1. Электроны, образующиеся в результате переходов, называются *основными* носителями и обозначаются n_n , а дырки в ВЗ – *неосновными* – p_n ; для ПП n-типа $n_n > p_n$ (*электронный ПП*).*

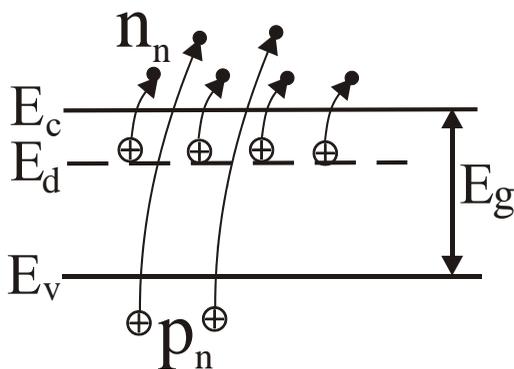


Рисунок 8.1 – Возникновение дополнительного уровня в зонной структуре полупроводника при введении примеси

Если в решётку кремния введём примесный атом с меньшей на единицу (и более) валентностью (бор B (III)), то для образования четырёх связей с соседними атомами привлекаются три собственных валентных электрона и один, заимствованный у соседнего атома основного вещества, где, собственно, образуется положительно заряженная вакансия – дырка. Последовательность заполнения образующихся дырок электронами эквивалентна движению дырок в ПП, т.е. дырки перемещаются в кристаллической решётке как свободные положительные заряды. Избыточный отрицательный заряд, возникающий вблизи атома примеси, связан с атомом примеси и перемещаться не может.

Согласно зонной теории, введение в ПП такой примеси приводит к возникновению в ЗЗ примесного акцепторного уровня E_a , вблизи потолка ВЗ E_v , незанятого электронами, что представлено на рисунке 8.2. Близость акцепторного уровня (уровней) к ВЗ ($E_a \sim 0,01$ эВ) приводит к тому, что уже при низких температурах электроны переходят на примесный уровень (уровни), связываются с атомами примесей и перестают перемещаться по решётке. Основными носителями являются дырки p_p , их концентрация $p_p > n_p$ неосновных носителей (электронов) в ПП p -типа (дырочном или акцепторном ПП).

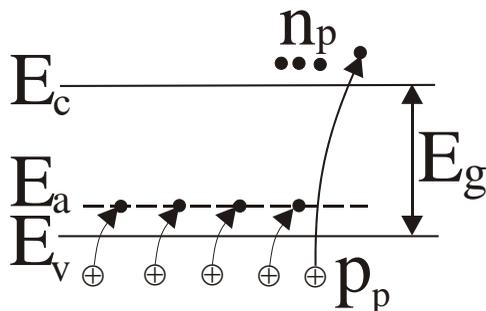


Рисунок 8.2 - Возникновение в запрещенной зоне примесного акцепторного уровня E_a , вблизи потолка валентной зоны E_v , незанятого электронами

Эффект Ганна обнаружен американским физиком Дж. Ганном (J.Gunn) в 1963 г. в кристалле арсенида галлия (GaAs), а затем фосфида индия (InP) с электронной проводимостью. Ганн обнаружил, что при приложении постоянного электрического поля E ($E_{пор} \geq 2-3$ кВ/см) к однородным образцам из арсенида галлия n -типа в образце возникают спонтанные колебания тока. Позднее он установил, что при $E > E_{пор}$ в образце, обычно у катода, возникает небольшой участок сильного поля - "домен", дрейфующий от катода к аноду со скоростью $\sim 10^7$ см/сек и исчезающий на аноде. Затем у катода формируется новый домен, и процесс периодически повторяется. Моменту возникновения домена соответствует падение тока, текущего через образец. Моменту исчезновения домена у анода - восстановление прежней величины тока. Период колебаний тока приблизительно равен пролетному времени, т.е. времени, за которое домен дрейфует от катода к аноду.

Возникновение эффекта Дж. Ганна возможно лишь в ПП, имеющих два минимума в зоне проводимости (ЗП), что изображено на рисунке 8.3, эффективная масса m^*_1 и m^*_2 в которых существенно отличаются, $m^*_1 < m^*_2$, следовательно, подвижности носителей тока (электронов) $\mu_1 > \mu_2$.

Отметим, что в дальнейшем изложении под массой частиц в ПП (например, полупроводнике) следует понимать *эффективную массу* m^* . Так как электрон в кристалле *квазисвободен* (лишь считается свободным), то коэффициент пропорциональности $m^* = \left(d^2 E / dp^2 \right)^{-1}$ (вспомним из классической физики

$$E = mv^2 / 2 = p^2 / (2m),$$

$$E_p'' = (2p / (2m))_p = 1 / m) \text{ хотя и имеет размерность мас-}$$

сы, но отличается по значению от массы покоя m_0 действительно свободной частицы. Поэтому говорят об эффективной массе электронов у дна ЗП и дырок у потолка ВЗ.

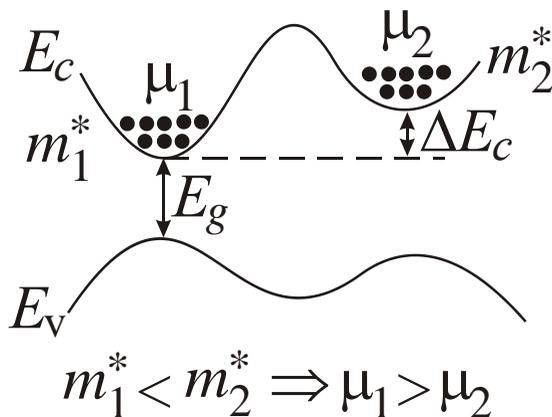


Рисунок 8.3 – Схема к объяснению эффекта Ганна

Электроны в центральном минимуме называются легкими, так как у них эффективная масса меньше массы покоя $m_1^* < m_0$, а в боковом минимуме – тяжелыми, так как $m_2^* > m_0$. Легкие электроны по сравнению с тяжелыми имеют высокую подвижность, $\mu_1 > \mu_2$.

При малой напряженности электрического поля (ЭП) $E_3 = U/l$, где U – напряжение на ПП, l – длина данного ПП (важный параметр!), все электроны находятся в центральном минимуме и плотность тока через ПП определяется по известной формуле

$$j_1 = ne \langle v \rangle = e \cdot \mu_1 \cdot n \cdot E_3.$$

С ростом напряженности ЭП при достижении ей порогового значения $E_{пор}$ у электронов появляется энергия $E > \Delta E_c$ и они могут перейти в боковой минимум с малой подвижностью. При значении напряженности ЭП E_0 все электроны перейдут в боковой минимум и плотность тока уменьшится до $j_2 = e \cdot \mu_2 \cdot n \cdot E_0$.

На рисунке 8.4 видно, что данная вольт-амперная характе-

ристика (ВАХ) напоминает латинскую букву N и потому называется *ВАХ N-типа* (есть еще приборы с *ВАХ S-типа*). Все приборы с ВАХ N- и S-типа обладают участком с отрицательным дифференциальным сопротивлением $R_{диф} = \Delta U / \Delta I < 0$, где с уменьшением напряжения наблюдается рост тока. Такие приборы могут быть использованы в качестве усилителей переменного сигнала, например, генератор Ганна, действие которого основано на эффекте Ганна.

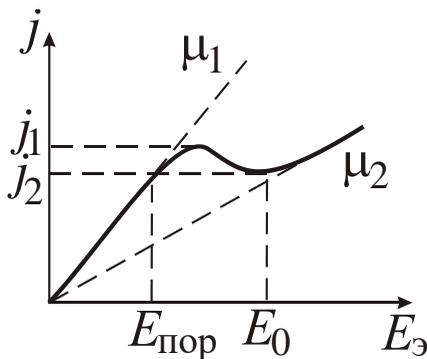


Рисунок 8.4 - Вольт-амперная характеристика генератора Ганна

8.2 Контактные явления в металлах и полупроводниках. ВАХ *p-n*-перехода. Пробой. Барьерная и диффузионная емкость *p-n*-перехода. Частотные свойства *p-n*-перехода. Полупроводниковые диоды, диоды Шоттки

При идеальном контакте двух ПП с различными типами проводимости из-за градиента концентрации носителей заряда возникает их диффузия в области с противоположным типом проводимости через плоскость металлургического контакта, что представлено на рисунке 8.5, а. В результате диффузии в *n*-области образуются некомпенсированные ионизированные доноры, а в *p*-области – некомпенсированные ионизированные акцепторы.

Образуется область пространственного неподвижного заряда, изображенная на рисунке 8.5, б, с электрическим полем, препятствующим дальнейшей диффузии носителей из области, где они являются основными, в область, где они являются неосновными.

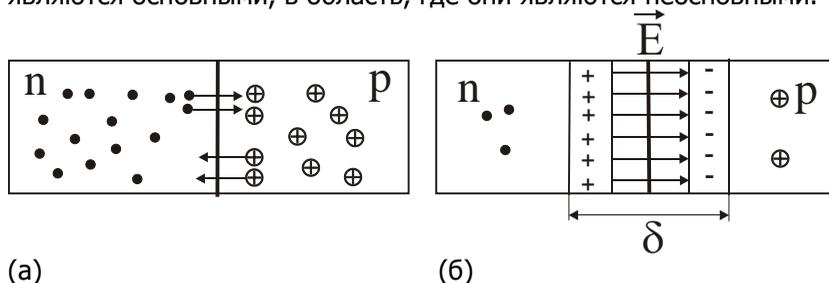


Рисунок 8.5 - Схема перераспределения зарядов на p-n-переходе

Возникает контактная разность потенциалов. В процессе диффузии зарядов в приконтактной области идёт интенсивная рекомбинация носителей зарядов, в результате чего эта область обедняется неподвижными носителями зарядов. Обедненный слой толщиной δ является запирающим слоем. В условиях термодинамического равновесия ток через p–n-переход не течёт, так как существует потенциальный барьер для основных носителей заряда, создаваемый полем области пространственного заряда вблизи металлургической границы. При приложении внешнего напряжения в случае прямого включения, изображенного на рисунке 8.6, а, электроны в n-области и дырки в p-области движутся к металлургической границе, ширина области пространственного заряда δ_0 уменьшается (δ) и через p–n-переход начинает течь электрический ток в результате *инжекции* (носители тока n_n в p-область, становятся n_p , а p_p – в n-область, становятся p_n). Возможный обратный процесс называется *экстракцией*, имеет место для неосновных носителей в области пространственного заряда, для которых её поле является ускоряющим. Чем больше приложено прямое напряжение U_{np} , тем меньше энергетический барьер для носителей заряда. Величина U_{np} ограничена возможностью разрушения перехода (разогрев и различного вида пробоя перехода).

При приложении обратного напряжения, изображение соответствует рисунку 8.6, б, создаётся обратная ситуация: δ растёт, высота потенциального барьера растёт с ростом обратного

напряжения (ограничение – возможность пробоя и разрушение перехода). Р-п-переход при обратном смещении ток не проводит, но, тем не менее, как вы уже знаете, возможен малый туннельный ток. В электронике кроме изоляции оксидными пленками применяют и изоляцию с помощью обратносмещенных р-п-переходов.

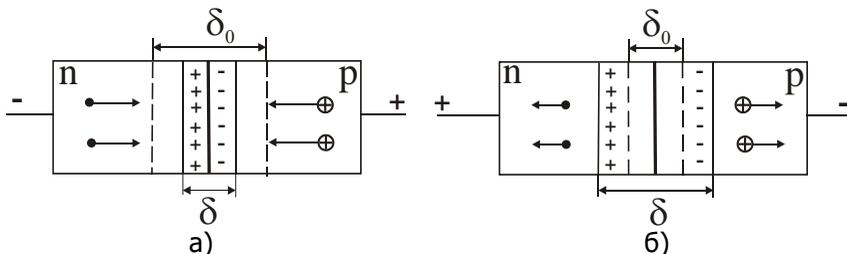


Рисунок 8.6 – Р-п-переход при обратном смещении

Р-п-переходы подразделяются на *гомопереходы* (один и тот же материал, но различных типов *n*- и *p*-) и *гетеропереходы* (разные полупроводники). Переходы делятся на *анизотипные* (*p*- и *n*-типа) и *изотипные* (n_1 -тип и n_2 -тип или r_1 -тип и r_2 -тип). По характеру сопряжения двух частей перехода на *металлургической границе* различают *резкий* (вплавление) и *плавный* (диффузия) *переходы*, *упругонапряжённый* или *сопряжённый (согласованный)* по периоду решётки (при жидкофазной эпитаксии). Обычно в обозначении электронно-дырочного перехода большой буквой обозначают полупроводник с большей шириной запрещённой зоны в данной паре, например, *N-p*, *P-n*, *N-Al_xGa_{1-x}As-p-GaAs* (*x* – мольная доля соединения *AlAs* в твёрдом полупроводниковом растворе *Al_xGa_{1-x}As*).

Вольт-амперная характеристика (ВАХ) гомо р-п-перехода представлена на рисунке 8.7. Сплошной линией нарисована ВАХ идеального перехода, на которой соответствующие участки для реального перехода должны быть заменены на пунктирные. При прямом включении это обусловлено рекомбинацией электронов и дырок в области перехода при инжекции, а при обратном включении обусловлено генерацией носителей в областях, примыкающих к области пространственного заряда (вблизи перехода). Генерация носителей происходит под действием запирающего ЭП при обратном включении, это ЭП является ускоряющим для неосновных носителей. Вертикальный участок при больших обратных напряжениях – *участок пробоя*. Пробой может возникать при больших значениях обратного напряжения, вызывающего

большое ускорение носителей тока и генерацию ими новых носителей при столкновениях с решеткой вплоть до образования лавины. При обратном включении возможен также и туннельный пробой. *Лавинный и туннельный пробои* обратимы, не вызывают разрушения перехода, но вследствие возникающего разогрева может возникнуть *тепловой пробой*. Тепловой пробой является необратимым и вызывает разрушение перехода, поломку приборов. Ряд ПП приборов работают в режиме пробоя, например, стабилитроны обеспечивают рост тока при практически постоянном напряжении. Следует отметить особо, что токи в прямом и обратном направлении по величине могут отличаться в тысячу раз и более (мА и мкА), прямые напряжения обычно $\sim V$, а обратные $\sim V$ или десятков V .

На рисунке 8.8 представлена зависимость ВАХ гомо $p-n$ перехода от температуры T . С ростом температуры увеличивается энергия носителей заряда и, следовательно, значение напряжения для достижения того же значения тока будет меньше при большей температуре.

На рисунке 8.9 представлена зависимость ВАХ гомо $p-n$ перехода от ширины запрещенной зоны (ЗЗ) ПП E_g . Чем больше ширина ЗЗ, тем большее напряжение необходимо прикладывать к переходу, чтобы сообщить необходимую энергию носителям тока (электронам и дыркам) для их участия в процессах электропроводности.

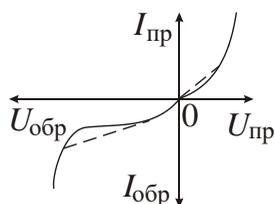


Рисунок 8.7- Вольт-амперная характеристика гомо $p-n$ перехода

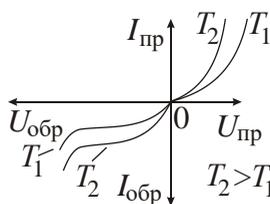


Рисунок 8.8 - Зависимость ВАХ гомо $p-n$ перехода от температуры T .

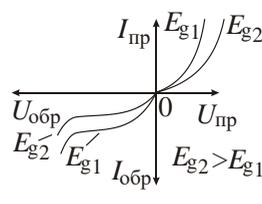


Рисунок 8.9 - Зависимость ВАХ гомо $p-n$ перехода от ширины запрещенной зоны

Если внимательно посмотреть на рисунок 8.5, б, то можно по-другому взглянуть на область пространственного заряда, а именно как на конденсатор с двумя противоположно заряженными пластинами. Любой конденсатор, как мы уже знаем, характе-

ризуется определенной емкостью. Емкость области пространственного заряда называется *барьерной емкостью*. Известно, что для плоского конденсатора $C = \epsilon\epsilon_0 S / \delta$. При прямом включении, изображенном на рисунке 8.6, а, ширина запирающего слоя δ уменьшается при диффузии основных носителей тока к металлургической границе, емкость перехода растет, при этом говорят о *диффузионной емкости*. Наличие у перехода емкости существенно влияет на его частотные свойства, т.е. на быстроту и качество переключения из прямого состояния (проводящего) в обратное состояние (запирающее, практически не проводящее).

При увеличении же частоты до некоторого критического значения носители не успевают выйти из области перехода, сопротивление из-за большой концентрации носителей в области перехода мало и практически не меняется (при смене полярности напряжения носители тока дергаются на одном месте туда–сюда). При высоких близких к критической частотах переход теряет свои запирающие свойства (свойство односторонней проводимости) и проводит ток в обе стороны практически без изменения его величины, изображено на рисунке 8.10. Это связано с затратами времени на перезарядку существующей емкости р–п-перехода, барьерной и диффузионной. При этом имеет значение величина концентрации неосновных носителей заряда, влияющая и на величину обратного тока. По сравнению с контактом двух полупроводников с различным типом проводимости концентрацию неосновных носителей (дырок, например) можно значительно уменьшить, используя контакт металл–полупроводник *n*-типа (электронный).

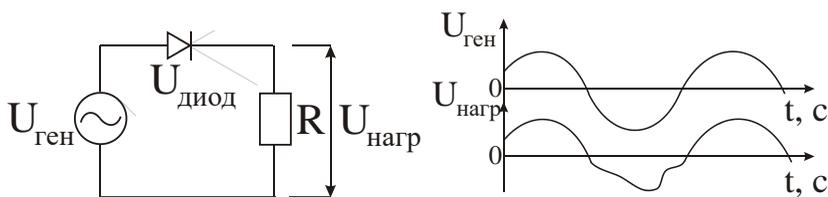
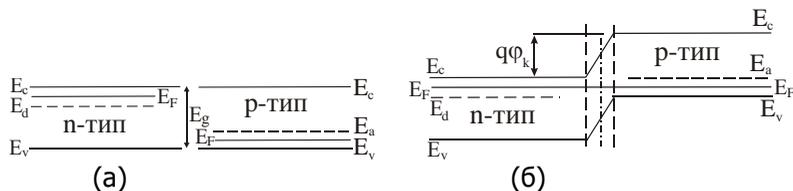


Рисунок 8.10 – Двухсторонняя проводимость р-п-перехода при высоких частотах

Такой контакт будет характеризоваться сравнительно небольшим значением концентрации неосновных носителей и значительно меньшим временем переключения из прямого смещения в обратное (и, наоборот) с сохранением запирающих свойств.

Можно говорить о значительном улучшении частотных свойств, возможности работы (сохранения выпрямления, односторонней проводимости) при гораздо больших по сравнению с p - n -переходом частотах, но и больших значениях обратного тока. Полупроводниковые p - n -переходы – основа полупроводниковых диодов, переходы металл–полупроводник – основа диодов Шоттки. Не всякий контакт металл–ПП является выпрямляющим, односторонне проводящим, только лишь те, для которых выполняется определенное соотношение работ выхода. Работой выхода называется энергия, которую необходимо затратить для выхода электрона из вещества в вакуум. Для ПП n -типа и металла соотношение должно быть $A_M > A_n$, а для ПП p -типа и металла соотношение должно быть $A_M < A_p$. При обратных соотношениях контакты не будут выпрямляющими.

Рассмотрим зонные диаграммы (энергетическую зонную структуру) p - n -перехода. На рисунке 8.11, а изображены зонные диаграммы для n - и p -полупроводников, (сравните с рисунками 8.1 и 8.2). На рисунке 8.11, б изображено совмещение зонных структур с рис. 8.11, а с выравниванием уровней Ферми. Напомним, что при контакте двух ПП с различным типом проводимости переход носителей будет происходить до наступления равновесия – до выравнивания энергии носителей в общей системе n -ПП- p -ПП или, как говорят, до выравнивания уровней Ферми в обоих ПП. Рис. 8.11 отражает энергетическую зонную структуру для рисунка 8.5, б. Наличие запирающего ЭП на рисунке 8.5, б обозначается через существующий для носителей потенциальный барьер (ПБ) $q\varphi_k$. Величина этого ПБ уменьшается для основных носителей при прямом включении, что представлено на рисунке 8.12, а, и растет при обратном включении, что изображено на рисунке 8.12, б


 Рисунок 8.11 - Зонные диаграммы n - и p - полупроводников

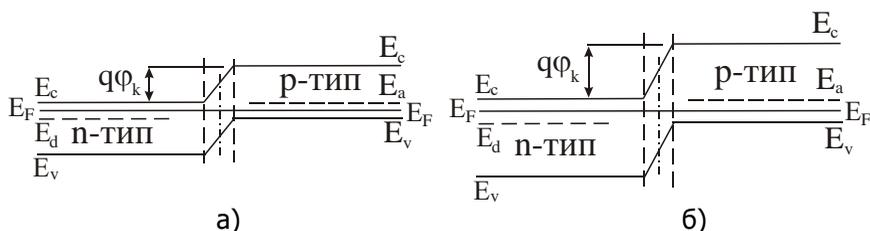
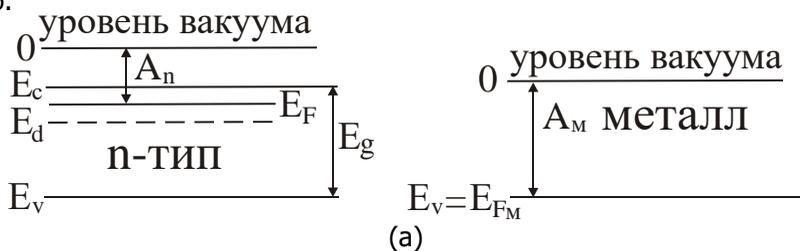


Рисунок 8.12 – а) энергетическая зонная диаграмма для случая на рисунке 8.6, а,;
 б) – для случая на рисунке 8.6, б

Рассмотрим контакт металл–ПП n -типа (электронный) при $A_M > A_n$. Так как концентрация электронов в металле порядка 10^{25} м³ против 10^{18} – 10^{19} м³ в ПП n -типа, то электроны будут переходить из ПП в металл с образованием в ПП слоя положительного заряда, а в металле – отрицательного, причем толщина контактного слоя в металле из-за большей концентрации электронов будет примерно в 10^4 раз больше, чем в ПП. Переход носителей будет происходить до наступления равновесия – до выравнивания энергии носителей в общей системе металл–ПП или, как говорят, до выравнивания уровней Ферми в металле и ПП. На рисунке 8.13, а изображены зонные диаграммы для n -ПП и металла при необходимом для создания выпрямляющего перехода соотношении работ выхода $A_M > A_n$. На рисунке 8.13, б изображено совмещение данных зонных структур с выравниванием уровней Ферми. На зонной диаграмме видно наличие двух различных ПБ: для электронов при переходе из ПП в металл $q\phi_k$, а для носителей

при переходе из металла в ПП – $q\phi_\sigma$. Величины этих ПБ изменяются при приложении прямого («+» – к металлу, «-» – к ПП) и обратного напряжения аналогично случаям на рисунках 8.12, а и б.



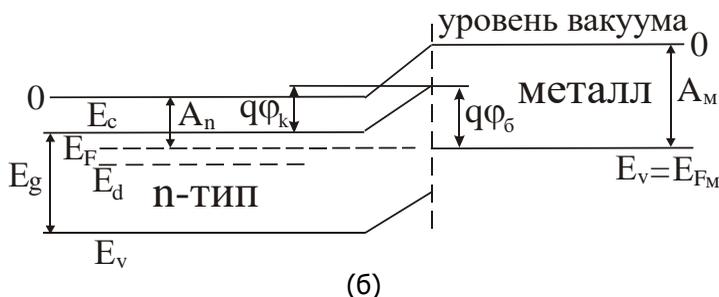


Рисунок 8.13 – Выравнивание уровней Ферми при контакте двух полупроводников

По аналогии может быть построена энергетическая зонная диаграмма для контакта металл–*p*-ПП при соответствующем соотношении работ выхода $A_M < A_p$.

Следует особо отметить, что, говоря о зонах и зонных диаграммах, мы имеем в виду не какие-то реально существующие в кристаллах (или переходах) зоны энергии. Данное рассмотрение – математическая модель расчета и представления энергетического спектра носителей в кристаллах (ПП и металлах), т.е. энергии носителей. Например, при значениях энергии электронов $\sim E_c$ (даже $\sim E_F$) они могут активно участвовать в процессах электропроводности.

При увеличении числа полупроводниковых *p-n*-переходов до трех и добавлении третьего электрода получается полупроводниковый триод или транзистор. Первый транзистор на германии был получен в США в 1948 году группой ученых (У.Шокли, У.Браттейн, Дж.Бардин), за свои работы в данной области они были удостоены Нобелевской премии в 1956 году. С изобретением полупроводниковых диода и триода (транзистора), заменяющих рассмотренные ранее громоздкие вакуумные (ламповые) приборы, началось бурное развитие микроэлектроники, что в настоящее время продолжается в виде развития наноэлектроники. Одним из серьезных недостатков *p-n*-переходов в полупроводниковых кристаллах является низкая температурная и влагу-стойчивость, требующая специальной защиты в аппаратуре. В последние годы в связи с необходимостью разработки электронной аппаратуры, способной работать при высоких температурах и резких ее перепадах, например, в условиях Венеры, получила вторую жизнь вакуумная микроэлектроника, в которой эмиссия электронов с поверхности тел и электрические токи в вакууме играют решающую роль.

8.3 Люминесценция твердых тел. Оптические и фотоэлектрические явления в полупроводниках

Оптоэлектроника – область науки и техники, исследующая и применяющая процессы взаимодействия оптического излучения с веществом для передачи, приёма, переработки, хранения и отображения информации.

Оптическое излучение – электромагнитное излучение оптического диапазона. Условно выделяемый диапазон от 1 мм до 1 нм. Внутри оптического диапазона выделяют видимое (0,38–0,78 мкм), инфракрасное (0,78–1000 мкм) и ультрафиолетовое (0,001–0,38 мкм) излучения. В видимом оптическом диапазоне по принципу «Каждый охотник желает знать, где сидит фазан» выделяют излучение: красное (620–780 нм), оранжевое (585–620 нм), жёлтое (550–585 нм), зелёное (510–550 нм), голубое (480–510 нм), синее (450–480 нм), фиолетовое (380–450 нм). Зелёный свет соответствует максимуму чувствительности человеческого глаза. В ультрафиолетовом диапазоне выделяют *УФ-ближнее* излучение (315–380 нм), *УФ-среднее* (280–315 нм) и *УФ-дальнее* (1–280 нм), в инфракрасном (ИК) диапазоне: *ИК-ближнее* (780 нм–1,5 мкм), *ИК-среднее* (1,5–20 мкм) и *ИК-дальнее* (20 мкм–1 мм).

Оптоэлектронные приборы можно подразделить на 3 группы:

- 1) приборы, преобразующие электрическую энергию в оптическое излучение (светодиоды, полупроводниковые лазеры – так называемая электролюминесценция);
- 2) приборы, детектирующие оптические сигналы за счёт протекающих под действием света электронных процессов (фотодетекторы);
- 3) приборы, осуществляющие преобразование оптического излучения в электрическую энергию (фотовольтаические приборы, солнечные батареи).

Люминесценцией называется *оптическое* излучение (ИК, видимое, УФ), возникающее в результате электронного возбуждения материала, в отличие от теплового излучения, обусловленного только тепловым нагревом материала. В зависимости от источника энергии возбуждения люминесценцию можно разделить на:

- 1) *фотолюминесценцию* (возбуждение оптическим излучением);
- 2) *катодолюминесценцию* (возбуждение под действием пучка электронов или катодных лучей);
- 3) *радиационную люминесценцию* (возбуждение другими быстрыми частицами или излучением высокой энергии);

Основы квантовой механики и ее приложения

4) *электролюминесценцию* (возбуждение электрическим полем или током);

5) *хемолюминесценцию* (при химических превращениях);

6) *триболюминесценцию* (при растяжении и раскалывании некоторых кристаллов, например, сахара) и так далее.

В случае оптоэлектронных приборов первой группы рассматривают электролюминесценцию и, прежде всего, *инжекционную электролюминесценцию*, которая представляет собой оптическое излучение, возникающее при инжекции основных носителей в область полупроводникового р–n-перехода, где имеются излучательные переходы (при рекомбинации пары электрон–дырка).

На рисунке 8.14 схематично представлены основные переходы в полупроводнике, из которых не все могут быть излучательными.

Группа 1 – *междузонные переходы*: а) собственное излучение с энергией, очень близкой к ширине $33 E_g$, которое может сопровождаться возбуждением фотонов и экситонов; б) излучение с более высокой энергией с участием так называемых энергичных или «горячих» носителей, которое иногда может быть связано с лавинным пробоем. Эти же переходы могут идти в обратном порядке с поглощением фотона, тогда группа 1 – *фундаментальное поглощение*.

Группа 2 – *переходы с участием химических примесей и физических дефектов*: в) между ЗП и акцепторным уровнем E_a ; г) между донорным E_d и акцепторным E_a уровнями (междузонное излучение); д) между донорным уровнем E_d и ВЗ; е) через глубокие уровни, которые образуют ряд химических примесей, акцепторных или донорных (как правило, с валентностью, отличающейся от валентности основного полупроводника больше, чем на единицу), либо физические дефекты кристаллической решётки.

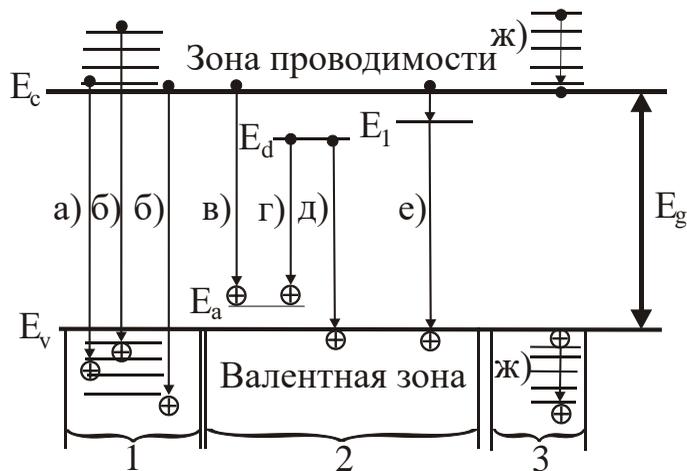


Рисунок 8.14 - Основные энергетические переходы в полупроводнике

Группа 3 – *внутренние переходы* (ж), которые вызывают излучение, называемое иногда тормозным, которые протекают с участием «горячих» носителей.

Не все переходы могут возникать в одном и том же материале или при одних и тех же условиях и не все из них могут являться излучательными. Эффективным сточки зрения люминесценции является такой материал, в котором излучательные переходы преобладают над безызлучательными в прямозонных и непрямоzonных полупроводниках. В силу зонной структуры люминесцентное излучение характеризуется сравнительно узким спектром (иногда линией), в отличие от теплового излучения, которое характеризуется сплошным спектром излучения.

Существуют три типа взаимодействия между фотонами и электронами в ТТ:

- 1) фотон может поглощаться в результате перехода электрона из заполненного состояния ВЗ или донорного уровня в свободное состояние ЗП (участвует в фототоке);
- 2) фотон может стимулировать излучение абсолютно идентичного себе фотона (одинаковые частота, поляризация, фаза), вызывая переход электрона из заполненного состояния в ЗП или донорного уровня на свободные состояния в ВЗ, что изображено на рисунке 8.15

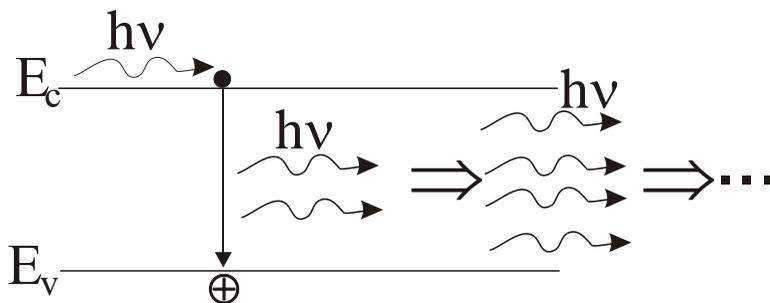


Рисунок 8.15 – Схема излучения фотонов

Данный тип взаимодействия лежит в основе принципа действия всех, в том числе полупроводниковых, лазеров;

3) *спонтанные* обратные переходы электронов из ЗП на свободные состояния в ВЗ, вызывающие испускание фотонов.

Для получения лавины идентичных фотонов (усиления излучения) необходимо, чтобы большая часть носителей одновременно пребывала в возбуждённом состоянии (на высоких энергетических уровнях) – так называемая *инверсная населённость среды*. Создаётся инверсная населённость либо вспышкой (газоразрядной лампы), либо уровнем плотности тока $j = I/S$ (S – площадь поперечного сечения в многослойной лазерной *гетероструктуре* (на основе гетеропереходов), что определяет уровень инжекции и далее – рекомбинации носителей в заданных *активных областях*).

В любом случае для создания инверсной населённости требуется *система накачки*, т.к. любая система всегда стремится к минимуму энергии. Расчёты показывают, что самопроизвольно высокая плотность занятых состояний с большей энергией достигалась бы при термодинамической температуре меньше нуля К, чего реально быть не может. Так в физику вошло понятие «*отрицательной термодинамической температуры*».

8.4 Эффект Зеебека, эффект Пельтье

При наличии разности температур $T_1 > T_2$ вследствие диффузии носителей от горячего спая к холодному в цепи с термоэлементом, изображено на рисунке 8.16, создается термоЭДС (эффект (1821 г.) Зеебека (1770–1831))

$$\mathcal{E}_T = \alpha \Delta T, \quad (8.1)$$

где α – коэффициент пропорциональности, коэффи-

циент термоЭДС, зависящий от химической природы материала и температуры.

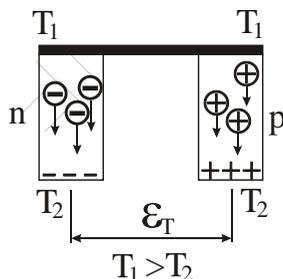


Рисунок 8.16 – К эффекту Зеебека

Рассмотрим принцип работы термоэлектрического холодильника (рис. 8.17) на основе *эффекта (1834 г.) Ж.Ш. Пельтье* (1785–1845).

Вследствие рекомбинации носителей на верхнем спае *выделяется теплота Пельтье Q_1* , при этом температура спае T_1 больше температуры окружающей среды $T_{\text{окр}}$. И наоборот, для генерации носителей на нижнем спае от решетки забирается энергия, в результате *поглощается теплота Пельтье Q_2* и $T_2 < T_{\text{окр}}$. Теплота Пельтье

$$Q = \pm \Pi It, \quad (8.2)$$

где $\Pi = \alpha T$ – коэффициент Пельтье, α – коэффициент термоЭДС, I – ток, t – время.

Естественно, что для обеспечения охлаждения даже небольшого объема необходимо множество термоэлементов, что изображено на рисунке 8.17. Достоинствами холодильников на ПП являются малая энергоемкость (выделяется больше тепла, чем затрачено энергии), бесшумность, а недостатками – малые объемы охлаждения, невозможность создания очень низких температур.

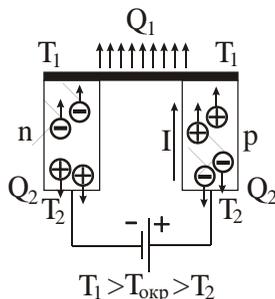


Рисунок 8.17 – К эффекту Пельтье

ГЛАВА 9. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА

9.1 Отрицательное поглощение света и оптические квантовые генераторы или лазеры (LASER – Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Виды лазеров: газовые, жидкостные, твердотельные (рубиновые, полупроводниковые)

При прохождении света через любую среду обычно наблюдается ослабление его интенсивности согласно закону Бугера–Ламберта (см курс общей физики). Однако возможен и обратный процесс – усиление света при отрицательном коэффициенте поглощения, тогда говорят об *отрицательном поглощении света вещством*. Почему это возможно?

Вспомним, что усиление и ослабление света при наложении от двух источников возможно только, если эти источники когерентны, т.е. если их излучение характеризуется одинаковыми частотой, поляризацией, направлением распространения и постоянной во времени и пространстве разностью фаз. Обычные источники света в привычных нам средах (устройствах) излучают некогерентно (несогласованно). Например, газоразрядная лампа дневного света, в которой атомы излучают свет по принципу «кто и когда захочет». При этом даже переходы электронов в атомах могут происходить между различными уровнями, тогда, согласно постулату Бора, будут различаться еще энергия и частота. Напрашивается вывод: усиление света будет происходить, если заставить возбужденные электроны в атомах одновременно переходить между одними и теми же энергетическими уровнями (индуцировать одновременные переходы) – такое излучение будет *индуцированным* и когерентным. Отсюда и пошло название устройства, в котором осуществляется такой процесс: *LASER – Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation – усиление света посредством индуцированного излучения*. Отечественным аналогом данного иностранного названия является *оптический квантовый генератор (ОКГ)*.

Идея использования индуцированного излучения для усиления излучения была впервые высказана советским физиком В.А.Фабрикантом (1907 г.р.) в его докторской диссертации. Впоследствии в 1951 году на эту идею было выдано авторское свидетельство.

Эйнштейн предположил, что кроме двух типов взаимодействия фотона с электроном (излучение фотона при переходе воз-

бужденного электрона на более низкий энергетический уровень и поглощение при возбуждении электрона, при его переходе на более высокий энергетический уровень) возможен и третий тип (рис. 8.15). В этом случае при взаимодействии (столкновении) фотона с возбужденным электроном электрон переходит на более низкий энергетический уровень с испусканием фотона полностью идентичного падающему (одинаковые частота, фаза, поляризация). В результате далее следуют уже два идентичных фотона. Для получения лавины идентичных фотонов (усиления излучения) необходимо, чтобы большая часть носителей одновременно пребывала в возбуждённом состоянии (на высоких энергетических уровнях) – так называемая *инверсная населённость среды*. Среда, в которой возможно создание инверсной населенности, называется *активной средой*. У атомов такой среды должны существовать несколько энергетических уровней, при этом в идеале излучательные переходы электронов должны осуществляться с подавляющей вероятностью только между двумя из них, все остальные переходы должны быть безызлучательными. Учитывается также, что *время жизни* (нахождения) электрона в каждом из возбужденных состояний различно, что предоставляет возможность накопления электронов в одном из *метастабильных состояний* (т.е. в состоянии с достаточно большим временем жизни, в идеале в состоянии именно перед излучательным переходом). Создаётся инверсная населённость внешним источником энергии – *системой накачки*. В зависимости от количества используемых (рабочих) уровней в атомах вещества среды накачка может быть моноуровневой (трех-, четырехуровневой – см. далее). Конкретный вид активной среды и системы накачки зависит от типа лазера. В любом случае для создания инверсной населённости требуется накачка энергии, т.к. любая система всегда стремится к минимуму энергии. Расчёты показывают, что самопроизвольно высокая плотность занятых состояний с большей энергией достигалась бы при термодинамической температуре $T < 0$ К, что не имеет смысла (по определению термодинамической шкалы $T = 0$ К – температура, при которой прекращается всякое движение). Так в физику вошло понятие «*отрицательной термодинамической температуры*».

В зависимости от типа используемой активной среды лазеры подразделяются на

- *твердотельные*: рубиновые $Al_2O_3-Cr^{3+}$ (1960г.), на неодимовом стекле (силикатное стекло с примесью ионов Nd^{3+} , концентрация Nd^{3+} в стёклах может достигать до 6% по массе), на флюо-

рите кальция CaF_2 с примесью редкоземельных элементов, таких как диспрозий Dy , самарий Sm и др., полупроводниковые (на GaAs (1962г.), GaSb , например);

- *газовые*: гелий–неоновый (1960г.);

- *жидкостные*: растворы неодима в неорганических жидкостях SeOCl_2 и растворы органических красителей (1966).

К 1973 году было известно примерно 200 различных лазерных материалов, охватывающих вещества во всех агрегатных состояниях: твёрдом, жидком, газообразном и в состоянии плазмы. В настоящее время всевозможные лазерные материалы перекрывают диапазон длин волн от менее 1 см до 3,3 мкм.

Впервые ОКГ с частотой 24 ГГц были созданы в 1954 году русскими физиками А.М.Прохоровым (1916 г.р.) и Н.Г.Басовым (1922 г.р.) на активной среде из аммиака (практически одновременно с американским физиком Ч.Таундсендом). Данный аппарат правильнее называть *мазером* из-за рабочей длины волны не из оптического, а из радиодиапазона: *Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation (MASER)*, что означает: усиление микроволн с помощью индуцированного излучения. Первый лазер именно в оптическом диапазоне был создан на рубине в 1961 году американским физиком Мейманом (1927 г.р.). В конце 1960 года американские физики Джаван (1926г.р.), Беннет (1903г.р.) и Эрриот сообщили о создании инверсной населенности и получении лазерного излучения на газовой смеси гелий–неон. Лазеры по продолжительности излучения подразделяются либо на импульсные, либо на лазеры непрерывной генерации. При генерации лазерного излучения среда сильно разогревалась, поэтому все лазеры поначалу имели мощную систему охлаждения, они не могли работать продолжительное время, т.е. в режиме продолжительной непрерывной генерации. Например, неохлаждаемый рубиновый лазер перестает генерировать излучение при нагреве до температуры $T > 1000$ К. Долгое время создать твердотельные лазеры с непрерывным режимом генерации излучения без принудительного охлаждения при комнатной температуре не удавалось. *Непрерывный режим лазерной генерации у полупроводникового лазера на GaAs при комнатной температуре* был впервые получен группой русских физиков под руководством Нобелевского лауреата Ж.И.Алферова в 1962 году. Рассмотрим виды лазеров и особенности их активных сред и систем накачки на ряде примеров.

В первом импульсном рубиновом лазере активной средой служил кристалл розового рубина (корунд) Al_2O_3 с примесью 0,05% оксида хрома Cr_2O_3 . Для достижения инверсной населенно-

сти использовались энергетические уровни ионов хрома Cr^{3+} , по некоторым оценкам, концентрация ионов в первом лазере составляла $1,62 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Корунд представляет собой диэлектрик с большой шириной запрещенной зоны, в которой и создает дополнительные уровни примесь хрома. Для ионов хрома характерна так называемая трехуровневая схема расположения энергетических состояний, представленная на рисунке 9.1

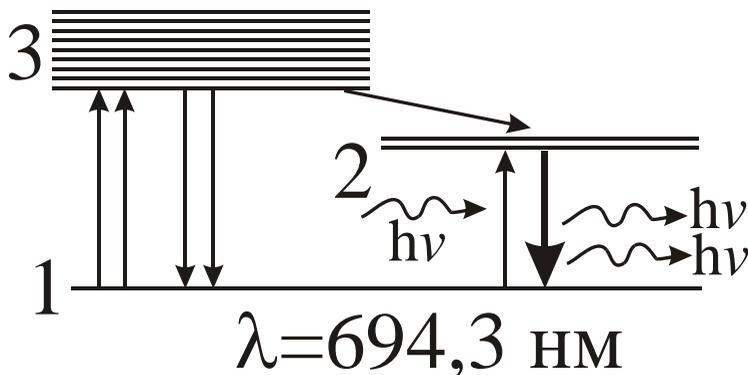


Рисунок 9.1 - Трехуровневая схема генерации лазерного излучения

Система накачки представляла собой мощную импульсную газоразрядную ксеноновую лампу, обвитую вокруг рубинового кристалла, представлена на рисунке 9.2. Под действием УФ-излучения лампы ионы хрома возбуждаются с определенной вероятностью и переходят на систему близкорасположенных уровней 3 и 2 (см. рисунок 9.1). Далее с определенной вероятностью для каждого перехода ионы могут перейти на уровень 1 или безызлучательно с уровней 3 на уровни 2 (энергия при этом выделяется все равно, но идет не на излучение, а на нагрев кристалла). Состояние 2 является *метастабильным*, так как время жизни в этом состоянии много больше времени жизни в состоянии 3 ($\sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ против $\sim 10^{-8} \text{ с}$). При переходе с узких уровней 2 на уровень 1 излучается красный свет (потому ионы хрома ответственны за розовую или красную окраску корунда в зависимости от их концентрации) с длинами волн $\lambda_1 = 694,3 \text{ нм}$ и $\lambda_2 = 692,9 \text{ нм}$. Для работы используют более интенсивную линию $\lambda_1 = 694,3 \text{ нм}$.

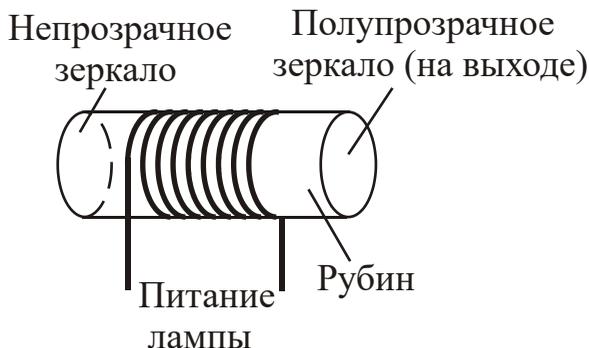


Рисунок 9.2 - Схема накачки лазера

Вообще рассматривая спектр лазерного излучения, можно выявить много линий (или частот, мод лазера). В идеале стараются добиться излучения лазера с единственной линией в спектре (одной частотой) или *одномодового режима генерации*. Практически это почти нереализуемо, так как в силу соотношения неопределенностей Гейзенберга–Бора любой энергетический уровень в атоме характеризуется некоторой конечной шириной (или малым интервалом частот).

Обратная связь в лазере осуществляется резонатором и представляет собой в простейшем случае следующее воздействие с «выхода» на «вход»: часть лавины фотонов, испускаемых при одновременном переходе в инверсной среде, возвращаясь в среду, вызывает образование новой лавины фотонов для последующего импульса излучения лазера. Для обеспечения обратной связи в первом рубиновом лазере применялся оптический резонатор Фабри–Перо (см. рисунок 9.2). Он состоял из двух зеркал, наносимых на торцы кристалла рубина, одно из зеркал непрозрачное, другое (на выходе) полупрозрачное. Часть хаотично направленных фотонов выходит через полупрозрачное зеркало (полезное излучение), часть – через боковые грани кристалла рубина (потери), а часть, отражаясь от непрозрачного зеркала, при последующей вспышке ксеноновой лампы идет обратно, вызывая новую лавину фотонов при одновременных излучательных переходах. Следует особо напомнить, что длина резонатора (и самого рубинового кристалла) должна отвечать для данной излучаемой длины волны света условию пространственной и временной когерентности.

В поздних конструкциях лазеров использовались более

сложные и совершенные системы накачки и резонаторы.

При наиболее распространенном для рубинового лазера импульсном режиме генерации лазерный импульс имеет сложную структуру: при длительности $\sim 10^{-3}$ с он состоит из коротких импульсов $\sim 10^{-6}$ с, происходящих через промежутки времени $\sim 3 \pm 10^{-6} - 10^{-5}$ с.

Спектры излучения и поглощения газов – линейчатые, линии излучения более узки по сравнению с линиями примесей в твердых телах, поэтому в газовом лазере можно получить большую монохроматичность, чем в твердотельном. При этом из-за малой плотности газов в них нельзя получить большие концентрации возбужденных атомов, поэтому мощность газовых лазеров меньше рубиновых.

Газовый гелий–неоновый лазер с импульсным и непрерывным режимом генерации, изображенный на рисунке 9.3, имеет в смеси гелий с парциальным давлением 130 Па (1 мм.рт.ст) и неон с парциальным давлением 13 Па (0,1 мм.рт.ст). Лазер состоит из стеклянной газоразрядной трубки со смесью газов, концы (торцы) которой закрыты плоскопараллельными пластинами Пл из кварца или стекла, установленными под углом Брюстера к ее оси. Это создает линейную поляризацию излучения с электрическим вектором, параллельным плоскости падения и позволяет исключить отражение поляризованного излучения лазера на торцах трубки. Зеркала 31 и 32 резонатора обычно сферические с многослойными диэлектрическими покрытиями для увеличения коэффициента отражения. Одно из зеркал имеет большую пропускную способность, чем второе (около 2% против 1%). Между катодом К и анодом А прикладывается постоянное напряжение $\sim 1-2$ кВ. Лазер может генерировать видимый красный свет с длиной волны 632,8 нм и инфракрасное (ИК) излучение с длинами волн 1150 и 3390 нм. В последнем случае торцы и зеркала лазера должны иметь большие коэффициенты отражения в ИК-области.

На рисунке 9.4 приведена упрощенная схема уровней гелия He и неона Ne.

Возбуждение газов происходит в результате столкновений их атомов с электронами газоразрядной плазмы. При некотором режиме разряда возникает инверсная заселенность уровней 1 и 2 неона. Заселенность уровней 1 и 3, 3 и 4 неона остается неинверсной, так как этому препятствует долгоживущий метастабильный уровень 5 неона, лежащий много ниже короткоживущего уровня 1 неона. В результате заселенность уровня 5 неона велика, за счет чего происходит пополнение быстро опустошающегося

уровня 1 неона и инверсии заселенности уровней 1 и 3 неона не возникает. Для атомов гелия спонтанный излучательный переход с уровней 2 и 3 на уровень 1 запрещен (характеризуется малой вероятностью). Атомы гелия, сталкиваясь с атомами неона, которые на уровне возбуждения 3 и 2 имеют почти такую же энергию, что и атомы гелия на уровне 3 и 2, передают им свою энергию. Благодаря такому процессу происходят безызлучательные переходы атомов гелия в невозбужденное состояние с резонансной отдачей энергии атомам неона. Именно в результате этого процесса возникает инверсная заселенность уровней 1 и 3 неона, а уже существующая для уровней 1 и 2 неона еще увеличивается.

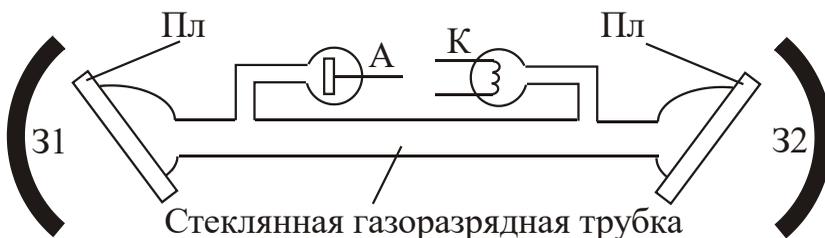


Рисунок 9.3 - Газовый гелий–неоновый лазер с импульсным и непрерывным режимом генерации

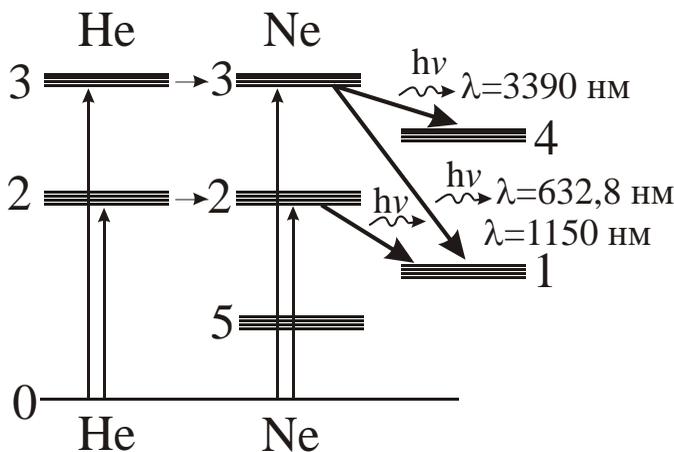


Рисунок 9.4 - Упрощенная схема уровней гелия *He* и неона *Ne*

Столкновения атомов на уровнях 1, 2, 3 неона со стенками трубки практически не влияют на заселенность этих уровней, так как они все короткоживущие. Атомы неона уровня 5 претерпевают многочисленные столкновения со стенками трубки из-за долгоживучести уровня 5. Столкновения разгружают уровень 5, иницилируя переходы атомов неона с уровня 1 на уровень 5. При этом опустошение уровня 1 неона при незаселенном уровне 5 происходит еще быстрее, чем при заселенном уровне 5. Разница заселенностей уровней 1 и 3 неона возрастает в результате такого процесса и повышает эффективность работы газового лазера в видимом оптическом диапазоне с длиной волны 632,8 нм. Столкновения атомов неона со стенками трубки наиболее эффективно опустошают уровень 1 неона (максимум мощности лазерного излучения) при диаметре трубки около 7 мм.

Полупроводниковый лазер (ППЛ) состоит из нескольких слоев разных ПП или одного и того же ПП с различным типом проводимости. Между слоями образуются электронно-дырочные переходы. Материалы слоев подбираются так, что инжектируемые носители тока (электроны и дырки) преимущественно локализуется (запираются переходами) в одном из слоев, называемом *активным слоем*. В этом слое происходит рекомбинация электронов и дырок с излучением избытка энергии в виде излучения (далеко необязательно в виде видимого света, это зависит от материалов ППЛ). Уровень инжекции через переходы зависит от величины прикладываемого напряжения и, следовательно, плотности тока в структуре (гетероструктуре) $j = I/S$, где S – площадь поперечного сечения слоев. Лазерная генерация начинается лишь при достижении некоторого критического – *порогового значения плотности тока* $j_{пор}$, обеспечивающего достаточный уровень (супер, сверх) инжекции носителей в активный слой. При плотности тока меньшей $j_{пор}$ ППЛ не генерирует лазерное излучение.

Фотоны, образующиеся в результате рекомбинации в активном слое, имеют различное направление. Для формирования избирательной (полезной) направленности лазерного излучения в структуру вводятся дополнительные ПП слои, обеспечивающие своими значениями показателей преломления (по отношению к рабочим слоям) появление полного отражения (волноводный эффект). В такой структуре рекомбинирующие носители заперты (локализованы) в активном слое, а образующееся при их рекомбинации излучение локализовано в плоскости активного слоя и нескольких (двух, четырех) соседних с ним слоев. Это уменьшает потери излучения и повышает мощность ППЛ. Так как величины

прикладываемых к электронно-дырочным переходам напряжений ограничены возможностью пробоя переходов, то значения пороговой плотности тока сравнительно невелики, поэтому по мощности ППЛ существенно уступает газовому и рубиновому лазерам.

В настоящее время ПП твердые растворы получили широкое практическое применение в электронной технике, начиная от базы транзисторов, диодов и светодиодов (принцип тот же, что и у ППЛ, различия по мощности и деталям структуры) и т.п. и заканчивая CD-ROM'ми, сотовыми телефонами, компьютерами, т.д. Изобретение ППЛ на ПП твердых растворах привело к бурному развитию медицины, систем записи, хранения, передачи информации, что, в свою очередь, вызвало бурное развитие почти всех отраслей экономики.

Лазерная технология используется для резки материала, нанесения рисунка на его поверхность, образование нужного микрорельефа на ней. Лазерная сварка позволяет соединить металлы и сплавы, не свариваемые обычным способом. В хирургии лазерный луч используется в качестве хирургического скальпеля. В офтальмологии лазерным лучом прикрепляют отслоившуюся сетчатку глаза. В связи с очень малой расходимостью лазерного луча, возможно с большой точностью производить юстировочные и нивелировочные работы, разметку территорий.

9.2 Жидкие кристаллы и их свойства

Жидкокристаллическим (ЖК) (мезаморфным, мезофаза – греч. mesos – промежуточный) состоянием вещества называется термодинамически устойчивое состояние. При котором вещество сохраняет анизотропию физических свойств, присущую ТТ, и текучесть, характерную для жидкостей.

ЖК состояние вещества существует только в определенном диапазоне температур. Нижняя граница – температура кристаллизации $T_{кр}$, ниже которой вещество существует только в виде ТТ, верхняя граница – температура $T_{ж}$, выше которой вещество превращается в однородную жидкость. Для большинства веществ это небольшой диапазон от минус 15 до плюс 55° С. *Жидкокристаллические кристаллы (ЖКК) – диэлектрики с удельным сопротивлением около $10^8 - 10^{13}$ Ом·м.*

Впервые свойства ЖКК наблюдал австрийский ботаник Ф. Рейнитцер в 1888 году, но широкое практическое их использование началось только после публикации результатов исследований Г.Х. Гейлмером в 1968 году.

Характерной особенностью ЖКК является удлиненная ните-

или палочкообразная (или же уплотненная дискообразная) форма их молекул, длиной порядка нм, а толщиной десятые доли нм. Такая форма способствует параллельной упаковке молекул в объеме ЖК вещества. Наличие преимущественной ориентации молекул объясняет анизотропию физических свойств ЖКК, например, его диэлектрической проницаемости и показателя преломления. Так как ориентация молекул задается внешним электрическим полем (ЭП), то ЖКК можно использовать для управления световыми потоками, проходящими через ЖК матрицу.

Направление, в котором ориентируются молекулы ЖКК при наложении внешнего ЭП, зависит от знака разности

$$\varepsilon_a = \varepsilon_p - \varepsilon_n, \quad (9.1)$$

где ε_p и ε_n – диэлектрические проницаемости ЖКК в направлениях, параллельном и перпендикулярном преимущественной ориентации больших осей молекул. ε_a называется *диэлектрической анизотропией ЖКК*. При $\varepsilon_a > 0$ большие оси молекул ориентируются вдоль прикладываемого к ЖКК ЭП, а при $\varepsilon_a < 0$ – перпендикулярно ЭП.

ЖКК подразделяются на 3 вида: *сметические*, представленные на рисунке 9.5, а, *нематические* – на рисунке 9.5, б и *холестерические* – на рисунке 9.5, в.

В сметических ЖКК молекулы располагаются параллельно своим большим осям, а их центры масс находятся в одной плоскости.

В нематических (*нета* – лат. нить) ЖКК большие оси молекул ориентированы параллельно друг другу, но центры масс молекул распределены в пространстве хаотично, не образуя четко выраженных слоев.

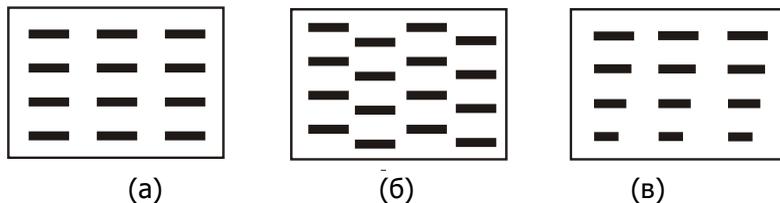


Рисунок 9.5 – схемы ЖКК, а) – сметики, б) – нематики, в) - холестерики

В холестерических ЖКК молекулы располагаются слоями, как и в смектических, но направление преимущественной ориентации их осей (называемое *директором*) монотонно изменяется от слоя к слою, поворачиваясь на некоторый угол.

На ЖКК наблюдается ряд эффектов, применяемых преимущественно в оптоэлектронике: эффект динамического рассеяния, твист-эффект, эффект «гость–хозяин», термооптический эффект, эффект деформации вертикально ориентированной фазы (или эффект двойного лучепреломления, управляемого полем), эффект фазового перехода, эффект избирательного отражения света. Известно также, что обработка и состояние поверхностей пластин в ЖК ячейке оказывает влияние на ориентацию молекул ЖКК.

Эффект динамического рассеяния заключается в помутнении прозрачного слоя нематического ЖКК при $\mathcal{E}_a < 0$ с ионной примесью при наложении внешнего ЭП. При $\mathcal{E}_a < 0$ большие оси молекул ориентируются перпендикулярно прикладываемому к ЖКК ЭП. При наложении внешнего ЭП ионы, двигаясь вдоль силовых линий ЭП, нарушают упорядоченную прозрачную структуру ЖКК. При росте прикладываемого напряжения до некоторого напряжения гидродинамической неустойчивости процесс протекает настолько бурно и турбулентно, что ЖКК мутнеет и начинает сильно рассеивать падающее на него излучение.

Твист-эффект (*twist* – англ. закручивать) заключается в изменении угла вращения плоскости поляризации света в нематических ЖКК с $\mathcal{E}_a > 0$, изображен на рисунке 9.6, а, под влиянием внешнего ЭП, изображено на рисунке 9.6, б. При $\mathcal{E}_a > 0$ большие оси молекул ориентируются вдоль прикладываемого к ЖКК ЭП, что представлено на рисунке 9.6, б, слой скрученного нематического ЖКК является оптически активным, т.е. вращает плоскость поляризации падающего света на угол $\pi/2$.

Основы квантовой механики и ее приложения

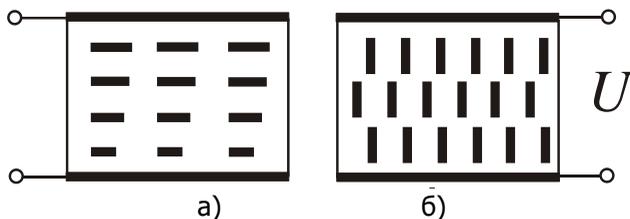


Рисунок 9.6 - Вращение плоскости поляризации скрученным нематиком

Эффект «гость–хозяин» наблюдается в ЖКК–хозяине при введении молекул красителя–гостя, имеющих похожую на ЖК вытянутую форму. Молекулы обоих видов располагаются параллельно поверхностям пластин аналогично рисунку 9.5, б. При наложении внешнего ЭП все молекулы поворачиваются перпендикулярно пластинам. В этом состоянии ЖК ячейка перестает интенсивно поглощать падающее на нее излучение, становясь прозрачно.

Термооптический эффект заключается в управлении интенсивности прошедшего через ЖК ячейку света при ее нагреве–охлаждении и действии высокочастотного ЭП: при однократном нагреве до превращения ЖКК в изотропную жидкость и последующем охлаждении ЖК ячейка становится непрозрачной; непрозрачность снимается при помещении ячейки во внешнее высокочастотное ЭП.

Все вышеописанные эффекты и ряд других эффектов и свойств обуславливают широкое применение ЖКК в оптоэлектронике, особенно в качестве основы устройств отображения информации (индикаторы, экраны дисплеев).