#### МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА И ПРОДОВОЛЬСТВИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ

ГЛАВНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ, НАУКИ И КАДРОВОЙ ПОЛИТИКИ

Учреждение образования «БЕЛОРУССКАЯ ГОСУДАРСТВЕННАЯ ОРДЕНОВ ОКТЯБРЬСКОЙ РЕВОЛЮЦИИ И ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННАЯ АКАДЕМИЯ»

В. В. Масич, А. В. Цвыр, Т. М. Чубукова

## ФИЗИКА

## ОПТИКА. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА. ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

### КУРС ЛЕКЦИЙ

Рекомендовано учебно-методическим объединением в сфере высшего образования Республики Беларусь по образованию в области сельского хозяйства в качестве учебно-методического пособия для студентов учреждений образования, обеспечивающих получение общего высшего образования по специальностям 6-05-0811-03 Мелиорация и водное хозяйство, 6-05-0532-03 Землеустройство и кадастры

> Горки БГСХА 2025

Одобрено методическими комиссиями мелиоративно-строительного факультета 26.12.2023 (протокол № 4), землеустроительного факультета 22.12.2023 (протокол № 4) и Научно-методическим советом БГСХА 27.12.2023 (протокол № 4)

Авторы:

доктор педагогических наук, профессор В. В. Масич; старший преподаватель А. В. Цвыр; старший преподаватель Т. М. Чубукова

Рецензенты:

кандидат технических наук, доцент А. Е. Маркевич; кандидат физико-математических наук И. Н. Сидоренко

#### Масич, В. В.

М31 Физика. Оптика. Квантовая механика. Физика твердого тела.
 Курс лекций : учебно-методическое пособие / В. В. Масич,
 А. В. Цвыр, Т. М. Чубукова. – Горки : БГСХА, 2025. – 172 с.
 ISBN 978-985-882-597-3.

Изложен теоретический лекционный материал по темам «Оптика», «Квантовая механика», «Физика твердого тела», приведена рекомендуемая литература.

Для студентов учреждений образования, обеспечивающих получение общего высшего образования по специальностям 6-05-0811-03 Мелиорация и водное хозяйство, 6-05-0532-03 Землеустройство и кадастры.

> УДК 53(075.8) ББК 22.3я73

#### ISBN 978-985-882-597-3

© УО «Белорусская государственная сельскохозяйственная академия», 2025

#### введение

Оптика – это наука о световых явлениях. Свет – это субъективное ощущение, создаваемое в органах зрения под воздействием электромагнитного излучения. Световая оптика относится к электромагнитным излучениям с длиной волны (от 0,4 мкм до примерно 0,75 мкм), которые вызывают ощущение света. Световой диапазон также включает инфракрасное (0,75 мкм) и ультрафиолетовое (0,4 мкм) излучение. Оптика делится на геометрическую и физическую. Геометрическая оптика изучает законы распространения света, не выясняя физическую природу явления. Физическая оптика, напротив, исходит из специфических представлений о природе света и на их основе объясняет те или иные явления света. Исходя из представлений о природе света, физическая оптика, в свою очередь, делится на волновую и квантовую.

#### І. ОПТИКА

#### Тема 1. ИНФОРМАЦИЯ ПО ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ И ВОЛНОВОЙ ОПТИКЕ

1.1. Общие сведения по геометрической оптике.

1.2. Общие сведения по волновой оптике.

#### 1.1. Общие сведения по геометрической оптике

Геометрическая оптика основана на экспериментальных законах. Основными понятиями являются: 1) источник света и как тело модели точечный источник света – источник света, геометрическими размерами которого можно пренебречь и который излучает его равномерно во всех направлениях; 2) луч представляет собой полупрямую линию, которая берет начало в источнике и указывает направление распространения света; 3) световой пучок как часть светового потока, ограниченная величиной телесного угла. Расслоения могут быть сходящимися, расходящимися и параллельными.

Мы будем рассматривать закономерности распространения света только в абсолютно прозрачных, однородных И. как изотропных правило, средах, свойства которых внезапно меняются на границе раздела, представляющей собой поверхность правильной геометрической формы. По форме этих поверхностей различают плоскую, сферическую и другую оптику.

В таких средах свет распространяется по прямой, лучи не



меняют своего направления (закон прямолинейности распространения света). Все изменения направлений распространения света происходят на границе раздела сред (рис. 1.1), где свет может отражаться обратно и преломляться, переходя в другую. На границе раздела сред свет частично отражается обратно и частично передается в следующую среду; падающий луч (*1* на рис. 1.1) раздваивается на отраженный 2 и преломлятется *3*. Ход этих лучей подчиняется следующим законам:

1) падающие, отраженные и перпендикулярные лучи, помещенные в точке падения на границу раздела сред, лежат в одной плоскости (см. рис. 1.1), которая называется плоскостью падения лучей;

2) угол падения равен углу отражения:  $\alpha = \beta$  (см. рис. 1.1);

3) отношение синуса угла падения α (см. рис. 1.1) к синусу угла преломления γ не зависит от угла падения, что является константой для данных двух сред и называется показателем преломления второй среды по отношению к первой:

$$rac{1}{2}$$

$$n_{21} = \frac{\sin \alpha}{\sin \gamma}$$

Как видно из рис. 1.1, углы падения, отражения и преломления – это углы, образованные соответствующими лучами с перпендикуляром к границе раздела сред, размещенными в точке падения луча.

Физическое содержание показателя преломления света позволяет установить принцип Гюйгенса, формулировка которого основана на волновых представлениях о природе света. Принцип позволяет выстроить положение фронта<sup>1</sup> волны (рис. 1.2) в произвольный момент времени, исходя из исходного положения

фронта. Он утверждает, что каждая точка среды и фронта волны, которой достиг волновой процесс, становится источником новых, сферических в однородной изотропной среде, волн. Новое положение фронта определяется как поверхность, огибающая все вторичные волновые поверхности.

Для построения нового положения фронта волны через промежуток времени  $\Delta t$  в точках предыдущего положения фронта *1* для момента времени *t* строим сферические поверхности радиусом  $c\Delta t$  (см. рис. 1.2).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Фронтом волны называют поверхность, разделяющую точки возбужденной волновым процессом среды от точек, еще не вовлеченных в волновой процесс.

Положение 2 фронта волны в момент времени  $t + \Delta t$  получим как огибающую этих вторичных сфер. Аналогично строится положение фронта 3 и т. д.

 $u_1$ 

Анализируя рис. 1.3, видно, что

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \gamma} = \frac{u_1 t}{u_2 t} = \frac{u_1}{u_2},\tag{1.1}$$

т. е.

$$n_{21} = \frac{u_1}{u_2}.$$
 (1.2)

Если первой средой является вакуум, то показатель преломления называется абсолютным, в других случаях это относительный показатель преломления. Абсолютный показатель преломления є константой данной среды является величиной табличной. Его принято изображать с одним индексом:

$$n_{1} = \frac{c}{u_{1}}, n_{2} = \frac{c}{u_{2}},$$

$$n_{\text{стекла}} = \frac{c}{u_{\text{стекла}}}, n_{\text{воды}} = \frac{c}{u_{\text{воды}}}$$
(1.3)

Рис. 1.3

где  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с – скорость света в вакууме.

Сопоставление выражений (1.3) и (1.1) дает возможность выразить относительный показатель преломления двух сред через их абсолютные показатели:



$$n_{21} = \frac{\sin \alpha}{\sin \gamma} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{n_2}{n_1}.$$
 (1.4)

Абсолютный показатель преломления света определяет оптическую плотность среды. Например, для стекла n = 1,55, для воды *n* = 1,33, а для алмаза *n* = 2,2, поэтому стекло оптически плотнее воды, но менее плотное, чем алмаз.

Если свет переходит из оптически менее плотной среды в более плотную, то угол преломления меньше угла падения (см. формулу (1.3) и рис. 1.1):  $\gamma < \alpha$ , преломленный луч прислоняется к перпендикуляру. Если наоборот, свет переходит в менее густую среду, то преломленный луч отходит от перпендикуляра  $\gamma > \alpha$ . В этом последнем случае может наблюдаться явление полного внутреннего отражения, когда угол преломления достигает 90°, после чего увеличение угла падения приводит к переходу луча в ту среду, из которой он пришел – наступает полное внутреннее отражение. Угол падения, при котором угол преломления равен 90° и преломленный луч скользит по поверхности разделения сред (рис. 1.4), называется предельным углом полного внутреннего отражения. Он определяется соотношением

$$n_{21} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{\sin \alpha_{np}}{\sin 90^\circ} = \sin \alpha_{np};$$
  

$$\sin \alpha_{np} = n_{21} = \frac{n_2}{n_1}.$$
(1.5)

Явление полного внутреннего отражения используется в поворотных и обратимых призмах, в которых, соответственно, луч возвращается назад, или меняет свое направление по-другому, или ход лучей через призму таков, что изображение предметов превращается из обратного в прямое, или наоборот.

#### 1.2. Общие сведения по волновой оптике

Волновая оптика рассматривает свет как электромагнитные волны частотного диапазона от 0,4 · 10<sup>15</sup> Гц до 0,76 · 10<sup>15</sup> Гц, вызывающие субъективные ощущения света. Электромагнитная волна – это электромагнитное поле, распространяемое взаимосвязанными вихревыми электрическими и магнитными полями со скоростью

$$u = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon\mu}},\tag{1.6}$$

где  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с – скорость света в вакууме;

ε – диэлектрическая проницаемость;

μ – магнитная проницаемость среды.

Показатель преломления света, как следует из его определения (см. формулы (1.3) и (1.6))

$$n = \frac{c}{u} = \sqrt{\varepsilon \mu}.$$
 (1.7)

В электромагнитной волне электрическое и магнитное поля изменяются во взаимно перпендикулярных направлениях, которые перпендикулярны направлению распространения (рис. 1.5).



Рис. 1.5

В каждый момент времени напряженности электрического и магнитного полей пропорциональны друг другу, а плотности энергий равны

$$\frac{\varepsilon\varepsilon_0 E^2}{2} = \frac{\mu\mu_0 H^2}{2} \tag{1.8}$$

и меняются в одинаковых фазах. Основной энергетической характеристикой электромагнитных волн является вектор Пойнтинга:

$$\vec{J} = \vec{E} \cdot \vec{H}.\tag{1.9}$$

Электромагнитные волны как свет, т. е. волны определенного диапазона имеют некоторые особенности. Магнитная проницаемость прозрачных для света веществ  $\mu \approx 1$ , т. е. они не взаимодействуют с магнитным полем такого частотного диапазона. Кроме того, биологическое действие света связано с электрическим полем волны. Ввиду этого, при рассмотрении света, как правило, оперируют только с вектором электрического поля, который называют *световым вектором*. Основной энергетической характеристикой света является его *интенсивность (I)*, которая пропорциональна модулю вектора Пойнтинга.

Ввиду особенностей света и из соотношений (1.8) и (1.9) имеем

$$I \approx \left| \vec{J} \right| = E^2, \tag{1.10}$$

т. е. интенсивность света пропорциональна квадрату модуля светового вектора, а показатель преломления света

$$n = \sqrt{\varepsilon}.\tag{1.11}$$

#### Тема 2. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ СВЕТА

2.1. Интерференция света и условия его наблюдения. Интерференция от двух точечных когерентных источников света.

2.2. Особенности световых волн. Временная и пространственная когерентность световых потоков. Принципы получения когерентных световых потоков.

2.3. Интерференция света в тонких пленках. Полосы равной толщины и равного наклона. Кольца Ньютона.

2.4. Практическое использование интерференции.

#### 2.1. Интерференция света и условия его наблюдения. Интерференция от двух точечных когерентных источников света

**Интерференция** является типично волновым явлением, которое обусловлено особенностями добавления колебаний при наложении волновых процессов с одинаковыми направлениями колебаний и заключается в возникновении устойчивого перераспределения энергии в пространстве. Сложение колебаний подчиняется принципу независимости, а колебания могут приходить к исследуемому участку пространства в одинаковой фазе, тогда они усиливают друг друга, или в противофазах, тогда колебания взаимно ослабляются.

Опыт учит, что для света в определенных условиях наблюдается интерференция. Это говорит о том, что свет имеет волновую природу.

**Интерференция света** – это явление устойчивого пространственного перераспределения интенсивности света; создание устойчивых максимумов и минимумов освещенности, или создание устойчивой интерференционной окраски в случаях наложения световых потоков сложного, например белого света. Видимая картина интерференции представляет собой последовательность светлых и темных или цветных полос. Задача теории состоит в том, чтобы: 1) объяснить, почему свет дает картину интерференции; 2) установить условия ее наблюдения; 3) дать аппарат расчета картины интерференции.

Свет дает картину интерференции потому, что он имеет волновую природу. Для получения ответов на остальные проблемы познакомимся более подробно с условиями наблюдения интерференции и с некоторыми особенностями света. Рассмотрим сложение двух плоских гармонических волн:

$$\xi_1 = A_1 \cos\left(\omega_1 t - \vec{k}_1 \cdot \vec{r} + \alpha_1\right) = A_1 \cos\Phi_1$$

$$\xi_2 = A_2 \cos\left(\omega_2 t - \vec{k}_2 \cdot \vec{r} + \alpha_2\right) = A_2 \cos\Phi_2$$
(2.1)

с сонаправленными колебаниями (см. рис. 1.5). Результирующий процесс  $\xi = \xi_1 + \xi_2$ . По методу, например, векторных диаграмм имеем для произвольного момента времени:

И

$$A^{2} = A_{1}^{2} + A_{2}^{2} + 2A_{1}A_{2}\cos(\Phi_{2} - \Phi_{1}),$$

или потому что интенсивность волнового процесса пропорциональна квадрату амплитуды, имеем:

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\Phi_2 - \Phi_1).$$
(2.2)

Результат сложения зависит от сдвига фаз  $\Phi_2 - \Phi_1$ , который в свою очередь зависит от частот  $\omega_1$ ,  $\omega_2$ ; волновых чисел  $k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1}$ ,  $k_2 = \frac{2\pi}{\lambda_2}$  и

т. д. (см. формулы (2.1)). Если смещение фаз не устойчиво, то среднее значение косинуса в выражении (2.2) равно нулю и интенсивность результирующего процесса равна сумме интенсивностей составляющих – интерференция отсутствует (см. уравнение (2.2)). Если сдвиг фаз устойчив, то результат сложения зависит от его величины. *В тех местах, где*  $\cos(\Phi_2 - \Phi_1) = 1$ , имеем интенсивность

$$I = I_1 + I_2 + \sqrt{2I_1I_2} > I_1 + I_2,$$

т. е. усиление интенсивности света, а в тех местах, где  $\cos(\Phi_2 - \Phi_1) = -1$ , имеем интенсивность

$$I = I_1 + I_2 - \sqrt{2I_1I_2} < I_1 + I_2,$$

т. е. ослабление интенсивности света. Таким образом, при условии постоянства сдвига фаз имеем пространственное перераспределение интенсивности и наблюдаем интерференцию. Волновые процессы с постоянным сдвигом фаз называются когерентными. Когерентность волновых процессов является необходимым условием наблюдения интерференции, а условие усиления интенсивности

$$\Delta \Phi_{\max} = \Phi_2 - \Phi_1 = 2k\pi, k = 0, 1, 2, 3, \dots,$$
(2.3)

когда косинус равен единице, носит название условия максимума интерференции. Следовательно, условие

$$\Delta \Phi_{\min} = \Phi_2 - \Phi_1 = (2k+1)\pi, k = 0, 1, 2, 3, \dots$$
(2.4)

есть условие минимума интерференции.

Для таких быстротечных процессов, какими является свет, достичь устойчивого сдвига фаз и когерентности световых волн возможно только при условии, что частоты колебаний совпадают или достаточно близки. Можно считать, не нарушая всеобщности рассмотрения, что начальные фазы колебаний возбудителей волн одинаковы, т. е.  $\alpha_1 = \alpha_1$ . При таких условиях сдвиг фаз

$$\Delta \Phi = \left(\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1\right),\tag{2.5}$$

или, если учесть, что векторы  $\vec{k}$  и  $\vec{r}$  параллельные, можно записать:

$$\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i = \frac{2\pi s_i}{\lambda_i} ,$$

где *s<sub>i</sub>* – путь, пройденный светом в *i*-й среде.

Известно, что показатель преломления среды  $n_i = \frac{\lambda_0}{\lambda_i}$ , поэтому

 $\lambda_i n_i = n_0$ . Учитывая такие преобразования, имеем для сдвига фаз (формула (2.5)):

$$\Delta \Phi = \frac{2\pi s_2}{\lambda_2} - \frac{2\pi s_1}{\lambda_1} = \frac{2\pi s_2 n_2}{\lambda_0} - \frac{2\pi s_1 n_1}{\lambda_0} = \frac{2\pi}{\lambda_0} (s_2 n_2 - s_1 n_1).$$
(2.6)

Оптический путь. Оптическая разность хода лучей. В формуле (2.6) выражение *s<sub>i</sub>n<sub>i</sub>* представляет так называемый оптический путь света в *i*-й среде. Если свет отражается от оптически более плотной среды, его *фаза изменяется на противоположную*, что равносильно потере половины длины волны. Эта потеря также включена в оптический путь. Поэтому *оптическим путем света* называется физическая величина, равная произведению геометрического пути, пройденного светом в некоторой среде, на показатель преломления этой среды за исключением половины длины волны, если было отражение от более плотной среды:

$$L_{i} = s_{i} n_{i} (-\frac{\lambda_{0}}{2}). \tag{2.7}$$

Физическая величина, определяемая как разность оптических путей, называется *оптической разностью хода* света:

$$\Delta = L_2 - L_1. \tag{2.8}$$

С учетом равенств (2.7) и (2.8) уравнение (2.6) переписывается так:

$$\Delta \Phi = \frac{2\pi}{\lambda_0} \left( L_2 - L_1 \right) = \frac{2\pi}{\lambda_0} \Delta, \qquad (2.9)$$

а *условия максимума и минимума интерференции* (формулы (2.8) и (2.9)) будут иметь такой вид:

$$\Delta_{\max} = k\lambda_0 = 2k\frac{\lambda_0}{2} \quad \text{i} \quad \Delta_{\min} = (2k+1)\frac{\lambda_0}{2}; k = 0, 1, 2, \dots$$
(2.10)

Таким образом, имеем ответы на остальные вопросы, которые ставятся теорией интерференции:

1) чтобы интерференция наблюдалась необходимо складывать когерентные световые потоки;

2) для расчета картины интерференции необходимо определить оптическую разницу хода световых потоков и сопоставить ее с условиями максимумов и минимумов интерференции (2.10).

Рассмотрим расчет интерференционной картины от двух точечных когерентных источников света в вакууме (рис. 2.1).

Два точечных когерентных источника света  $S_1$  и  $S_2$  расположены на расстоянии d друг от друга. Картина интерференции наблюдается на экране E, что находится на расстоянии L от плоскости, в которой находятся источники света. Для расчета интерференционной картины в точке C (с координатой x) экрана достаточно определить оптическую разность хода лучей  $S_1C$  и  $S_2C$  и уметь применять ее в условиях максимумов и минимумов интерференции света (2.10). Опыт указывает на то, что картина интерференции света наблюдается в условиях, когда  $d \ll L$ , а также  $x \ll L$ . Поэтому оптическая разность хода лучей в вакууме совпадает с геометрической разницей длин расстояний от источников света до исследуемой точки экрана:  $\Delta = S_2 C - S_2 C \approx S_2 B$ .



Рис. 2.1

Из подобия треугольников  $S_2S_1B$  и *CAO* имеем, что

$$\Delta = x \frac{d}{L}; \quad x = \frac{L}{d} \Delta. \tag{2.11}$$

Воспользовавшись условием максимума интенсивности света, получим координаты максимумов на экране наблюдения:

$$x_k = k \frac{L\lambda}{d}; \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (2.12)

На экране рис. 2.1 этим точкам соответствуют максимумы графика интенсивности *I* света.

В точках экрана с координатами

$$x_m = (2m+1)\frac{L\lambda}{2d}; \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (2.13)

наблюдаются минимумы интенсивности света или его полное погашение.

Расстояние между двумя соседними минимумами интерференции носит название *ширины интерференционной полосы*:

$$\Delta x = x_{m+1} - x_m = \frac{L\lambda}{d},\tag{2.14}$$

зависит она от расстояния между источниками света и, если расстояние между ними большое, интерференционные полосы будут слишком близко, потому что каждая полоса имеет свою ширину, картина интерференции будет невидимой.

*Условие видимости картины интерференции.* Картина интерференции является видимой, если интенсивности света в максимуме и в минимуме связаны критерием видимости

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}$$
(2.15)

и если он не меньше 0,1, т. е.  $I_{\text{max}} \ge 0.82 I_{\text{min}}$ .

# 2.2. Особенности световых волн. Временная и пространственная когерентность световых потоков. Принципы получения когерентных световых потоков

Как упоминалось выше, свет по своей природе электромагнитные волны. Благодаря особенностям взаимодействия света с прозрачными средами в волновой оптике, свет рассматривается как процесс распространения колебаний светового вектора (см. п. 2.1). Свет, излучаемый обычными источниками, является результатом несогласованного ни по направлению колебаний светового вектора, ни по начальной фазе, ни даже по частоте излучения отдельных атомов. Более того, излучение отдельного атома принципиально не может быть монохроматическим, потому что акт излучения длится конечный промежуток времени. Имея периоды нарастания, установленный процесс и затухание, излучение отдельного атома, так называемый цуг волн, может быть представлен суперпозицией гармонических волн частотного диапазона  $(\omega \pm \Delta \omega / 2)$ . Цуг волн может принимать участие в создании картины интерференции при условии, что сдвиг фаз между центром частотного диапазона и его пределом не превышает л, т. е. чтобы колебания от центра не уничтожались колебаниями от других составляющих цуга:

$$\left(\omega + \frac{\Delta\omega}{2}\right)t - \omega t \le \pi \Longrightarrow \Delta\omega t \le 2\pi.$$

Предельное значение разрешенного времени

$$\tau = \frac{2\pi}{\Delta\omega} \tag{2.16}$$

носит название *времени когерентности цуга*, а расстояние, определяемое временем когерентности,

$$l_{\rm KOF} = c\tau = \frac{2\pi c}{\Delta\omega},\tag{2.17}$$

где с =  $3 \cdot 10^8$  м/с – скорость распространения света в вакууме, называемая *когерентной длиной цуга*.

Если считать, что время когерентности цуга определяется временем жизни возбужденного состояния атома, переходом из которого происходит излучение и который составляет промежуток  $\Delta t \sim 10^{-8} c = \tau$ , то  $l_{\rm kor} \sim 3$  м, т. е. это довольно существенная длина. Но излучение отдельных атомов исчезающе слабое, а согласованное излучение большого количества атомов возможно только в специальных устройствах, в так называемых одномодовых лазерах, где когерентная длина может быть даже существенно больше приведенного выше значения. Реальные, природные и искусственные источники света имеют несогласованное излучение отдельных атомов. Когерентная длина излучения природных источников света достаточно мала, и для получения когерентных искусственными световых потоков пользуются приемами. Для получения когерентных световых потоков необходимо один световой поток разделить, сделать два или несколько, создать сдвиг фаз, а затем наложить их, т. е. дать возможность складывать волны, излучаемые за один акт излучения одними и теми же атомами.

Свет, используемый для наблюдения интерференции, имеет длины волн в некотором диапазоне  $\left(\lambda \pm \frac{\Delta \lambda}{2}\right)$ . Интерференционная картина от разных участков спектра приводит к ее стушевке благодаря перекрыванию их максимумов и минимумов. По *критерию Рэлея* интерференция видна, пока максимум из границы спектра не совпадет с минимумом от центра спектральной полосы, т. е. имеет место равенство оптических путей:  $m_{\rm g} \left(\lambda + \frac{\Delta \lambda}{2}\right) = \left(2m_{\rm g} + 1\right) \frac{\lambda}{2}$ , где  $m_{\rm g}$  – номер макси-

мально допустимой, еще видимой интерференционной полосы.

По этому критерию  $m_{\rm pl} = \frac{\lambda}{\Delta \lambda}$  можно определить так называемую когерентную длину излучения:

$$l_{\rm KO\Gamma} = m_{\rm A}\lambda = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}; \quad l_{\rm KO\Gamma} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}.$$
 (2.18)

Например, если солнечный свет видимого диапазона имеет длины от 0,4 мкм до 0,75 мкм, то  $\lambda \approx 0,52$  мкм, а  $\Delta \lambda = 0,35$  мкм, тогда  $l_{\rm коr} \approx 0,77$  мкм, т. е. достаточно мала в пределах одной интерференционной полосы. Чтобы увеличить когерентную длину и таким образом увеличить количество наблюдаемых интерференционных полос, необходимо сузить, как видно из формулы (2.18), интервал  $\Delta \lambda$ . Сужение достигается с помощью светофильтров. Хорошие интерференционные фильтры позволяют наблюдать десятки и даже сотни интерференционных полос. Условие (2.18) определяет *временную когерентность света*. Дело в том, что это условие эквивалентно другому, определяющему *время когерентности излучения*:

$$l_{\text{KOF}} = \frac{\lambda^2}{\Delta \lambda} = \frac{2\pi c}{\Delta \omega} = c\tau_{\text{KOF}}; \quad \tau_{\text{KOF}} = \frac{l_{\text{KOF}}}{c} = \frac{2\pi}{\Delta \omega}, \quad (2.19)$$

где *с* – скорость света;

 $\Delta \omega$  – интервал частот используемого света.

Формально по критерию Рэлея мы получили результат, аналогичный времени когерентности цуга атомов (2.17), но он имеет определенное внутреннее отличие.

Картину интерференции возможно наблюдать, если оптическая разница хода не превышает когерентной длины:

$$\Delta \le l_{\rm KOF} = \frac{\lambda^2}{\Delta \lambda}.$$
(2.20)

Помимо временной интерференции, возможность наблюдения интерференции требует соблюдения условия пространственной когерентности источника света. Создание мощных световых потоков требует увеличения размеров излучающей поверхности, что в свою очередь приводит к стушевыванию картины интерференции. Условия возникновения интерференции света от разных участков излучателя разные, максимумы интерференции от одних участков могут накладываться на минимумы от других – картина становится невидимой (см. критерий (2.15)). Таким образом, размеры источника света должны быть оптимальными. Критерием оптимальности и выполнения условия пространственной когерентности источника света является его радиус когерентности.

Принципиальная схема наблюдения картины интерференции приведена на рис. 2.2. От источника света, допустимые размеры  $\rho$  которого определяются, свет попадает в делитель  $S_1S_2$  под углом  $2\alpha$  (*anepmyра интерференции*), после чего, уже от двух искусственных источников  $S_1$  и  $S_2$ , распространяется на экран наблюдения *E*.



Рис. 2.2

Возможные графики распределения интенсивности света *I* в результате интерференции приведены на рис. 2.2. Сплошной линией изображен график для света, идущего от центральной части источника, а пунктиром – от периферийной части в отдалении  $\rho$  от центра. Оптическая разность хода между этими потоками  $\Delta = 2\rho \sin \alpha$ . Она не должна превышать половины длины волны, иначе интерференционные максимумы света от центральной части совпадут с минимумами от периферийных частей источника света. Условие

$$\Delta = 2\rho \sin \alpha \le \frac{\lambda}{2} \quad \text{откуда} \quad \rho \le \frac{\lambda}{4\sin \alpha} \tag{2.21}$$

определяет так называемый *радиус когерентности р источники света* и условие соблюдения его пространственной когерентности. *Радиус когерентности* зависит от длины волны, но в первую очередь от угла вхождения света в делитель, от апертуры интерференции. Если этот угол стремится к нулю, то допустимые размеры источника могут быть достаточно значительными, как это есть, например, для солнечного света.

# 2.3. Интерференция света в тонких пленках. Полосы равной толщины и равного наклона. Кольца Ньютона

Явление интерференции света имеет достаточно широкое распространение и практическое использование. Интерференцией света объясняется окраска тонких прозрачных пленок масла, бензина на поверхности воды, окраска мыльных пузырей и т. д. Интерференция используется для так называемого просветления оптических линз, где на линзу наносится тонкая пленка, дающая максимум интерференции в лучах, проходящих через линзу, и минимум для отраженного луча. Световой поток отражается от одной и второй поверхностей пленок и после наложения отраженных потоков, если выполняются условия временной (2.16), (2.18), (2.19) и пространственной (2.21) когерентности, наблюдается картина интерференции.

Для количественной оценки картины интерференции рассмотрим прохождение параллельного потока света через плоско параллельную пленку (рис. 2.3) толщиной *d* из прозрачного материала с показателем преломления *n*. Пленка находится в воздухе.



Рис. 2.3

Световой поток интенсивности  $I_1$ , которому соответствует луч I, попадая на поверхность пленки, частично отражается в воздух и частично преломляется в материал пленки, а луч I раздваивается на луч отраженный 2 и преломленный 3. В точке B луч света снова раздваива-

ется на преломленный в воздух 4 и отраженный 5. В точке С луч 5 раздваивается на отраженный 6 и преломленный в воздух 7. Луч 6 раздваивается на преломленный 8 и отраженный 9. Потоки света, изображенные лучами 2 и 7 и 4 и 8 соответственно, в случае, если оптическая разница их хода не превышает когерентной длины света, дадут интерференционные картины в отраженном свете и в свете, что прошел через пленку. Коэффициент отражения света прозрачными пленками поэтому интенсивности лостаточно мал. световых потоков  $I_1 \approx I_3 \approx I_4 >> I_2 \approx I_5 \approx I_7 >> I_6 \approx I_8 >> I_9$ . Это значит, что потоком света, соответствующим лучу 9 и т. д., уже можно пренебрегать. В отраженном свете картина интерференции наблюдается достаточно ярко, так что интенсивности потоков света 2 и 7 примерно одинаковы и интерференционное погашение происходит почти до полной темноты, а на фоне темных полос светлые интерференционные полосы хорошо заметны.

У света, прошедшего через пленку, картина интерференции заметна значительно хуже потому, что интенсивности соответствующих световых потоков ( $I_4 >> I_8$ ) существенно разные. Интерференционная картина имеет слабые колебания результирующей интенсивности света. Для наблюдения картины интерференции свет собирается с помощью соответствующих оптических линз Л1 и Л2.

Оптическая разность хода лучей 2 и 7, возникающая до положения плоского фронта *CD*, из геометрических соображений и из определения показателя преломления и того факта, что при отражении света от оптически более плотной среды пленки теряется половина длины волны

$$\Delta = \left(AB + BC\right)n - \left(AD - \frac{\lambda}{2}\right) = 2dn\cos\gamma + \frac{\lambda}{2} = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2\alpha} + \frac{\lambda}{2}.$$
 (2.22)

В проходящем свете оптическая разность хода отличается только отсутствием потери половины длины световой волны, так как отражение света происходит от оптически менее плотной среды. Таким образом, условие усиления света и условие наблюдения световой полосы в отраженном свете:

$$2dn\cos\gamma = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2\alpha} = (2k - 1)\frac{\lambda}{2}; k = 1, 2, 3, \dots$$
 (2.23)

Одновременно – это условие минимума и условие существования более темной полосы в проходном свете.

Условие темной интерференционной полосы и условие минимума отраженного света

$$2dn\cos\gamma = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2\alpha} = k\lambda; k = 1, 2, 3, \dots$$
 (2.24)

Одновременно – это условие максимума и условие существования более светлой полосы в проходном свете.

Оптическая разность хода лучей зависит как от толщины пленки, так и от угла падения света на поверхность пленки. Условно выделяют *полосы равной толщины* – это интерференционная окраска, которая возникает во время освещения параллельным световым потоком пленок переменной толщины и *полосы равного наклона* для интерференционной окраски в пленке равной толщины, освещаемой расходящимся потоком света.

Для наблюдения полос равного наклона глаз наблюдателя аккомодируется на бесконечность, т. е. они наблюдаются на бесконечности. Полосы равной толщины, в зависимости от угла падения лучей на пленку, могут иметь действительное изображение непосредственно над поверхностью пленки, или воображаемое – непосредственно под нижней поверхностью пленки.

Одним из примеров интерференционных полос равной толщины являются так называемые *кольца Ньютона*. Это интерференционная картина, возникающая за счет прохождения света в системе «плосковыпуклая линза – плоско-параллельная пластинка» (рис. 2.4). Они



Рис. 2.4

наблюдаются за счет интерференции световых потоков, отраженных от выпуклой поверхности линзы (В) с радиусом кривизны *R* и ближней поверхности пластинки (С). Если выполняются условия временной (2.19) и пространственной (2.21) когерентности, наблюдается картина интерференции. Световые потоки, поверхноотраженные стями соответственно А и *C*; *A* и *D*; *B* и *D*, не соответствуют этим условиям, они не когерентны и в создании картины интерференции не принимают участия.

Для количественного определения картины найдем оптическую разность хода, возникающую в зазоре толщиной  $d_k$ , т. е. в месте расположение k-го кольца с радиусом  $r_k$ :

$$\Delta = \left(d_k n - \frac{\lambda}{2}\right) + d_k n = 2d_k n - \frac{\lambda}{2}, \qquad (2.25)$$

где *n* – показатель преломления света средой, заполняющей зазор.

По геометрии рис. 2.4 видно, что  $(2R - d_k)d_k = r_k^2$ , или, потому что  $d_k << R$ , имеем  $2d_k = \frac{r_k^2}{R}$ , и  $\Delta = \frac{r_k^2}{R}n - \frac{\lambda}{2}$ . Сопоставив оптическую

разность хода лучей с условиями максимума и минимума интерференции (2.10), получим формулы для расчета радиусов светлых и темных колец Ньютона в отраженных лучах:

а) для светлых

$$\Delta_{\max} = \frac{r_k^2}{R} n - \frac{\lambda}{2} = 2k\frac{\lambda}{2} \implies r_k = \sqrt{(2k+1)R\frac{\lambda}{2n}}; \qquad (2.26)$$

б) для темных

$$\Delta_{\min} = \frac{r_k^2}{R} n - \frac{\lambda}{2} = (2k - 1)\frac{\lambda}{2} \implies r_k = \sqrt{kR\frac{\lambda}{n}} .$$
 (2.27)

Как на то указывалось ранее, картину колец Ньютона можно наблюдать и в проходящем свете, хотя картина колец будет менее выразительной. Соответственно условие (2.27) является условием минимумов, т. е. темных колец, а условие (2.26) есть условие наблюдения светлых колец Ньютона в проходном свете.

#### 2.4. Практическое использование интерференции

Явление интерференции используется в ряде точных измерительных приборов, носящих название *интерферометров*. Общая идея интерферометров заключается в разделении светового потока на два с последующим их сведением в зрительной трубе или другом анализирующем устройстве. Точное измерение заключается в сопоставлении оптических путей различных световых потоков. Точность измерения достигает десятых долей длины волны, которая сама имеет порядок десятых долей микрометра, т. е. точность достигает порядка  $10^{-7}$ – $10^{-8}$  м.

Для определения чистоты полировки поверхности используются кольца Ньютона, где по форме колец Ньютона имеют информацию о качестве поверхности.

Оптические системы имеют тот недостаток, что отраженный свет искажает оптические изображения. Оптические линзы покрываются тонким слоем прозрачного вещества с таким расчетом, чтобы иметь в отраженных лучах интерференционный минимум, а в проходящих, наоборот, интерференционный максимум для использованной длины волны. Если используется белый, сложный свет, то указанные условия невозможно выдержать для всего светового диапазона. Расчет производится для середины светового диапазона, т. е. на зеленый свет длиной волны порядка 0,55 мкм. Для границ светового диапазона, т. е. для красного света и для синего, наоборот, наблюдается максимум в отраженных лучах и минимум в проходных. Отраженный такими просветленными линзами свет имеет голубую окраску, состоящую из красного и синего.

#### Тема З. ДИФРАКЦИЯ СВЕТА

3.1. Дифракция волн. Дифракция света. Принцип Гюйгенса – Френеля. Метод зон Френеля.

3.2. Дифракция Френеля от круглого отверстия в диафрагме и от круглого экрана. Светлое пятно Пуассона.

3.3. Дифракция Фраунгофера. Роль линзы в наблюдении дифракционной картины. Таутохронизм оптических систем. Дифракция от щели и двух щелей между полуплоскостями.

3.4. Дифракционная решетка. Формула решетки. Характеристики дифракционной решетки как спектрального устройства.

3.5. Дифракция рентгеновского излучения на пространственной решетке. Формула Вульфа – Брэгга.

#### 3.1. Дифракция волн. Дифракция света. Принцип Гюйгенса – Френеля. Метод зон Френеля

Дифракция – это типично волновое явление, которое заключается в захождении волн в область геометрической тени, иными словами, приводит к нарушению прямолинейности распространения волн. Опыт учит, что дифракция света наблюдается и это указывает на его волновую природу.

Задача теории дифракции – объяснить явление и дать его количественное описание, т. е. дать описание распределения интенсивности света по преграде. Качественно явление дифракции объясняется с помощью **принципа Гюйгенса** (см. п. 1), который утверждает, что каждая точка среды, до которой дошла волна, становится источником новых сферических (в изотропной однородной среде) волн. Поэтому волны заходят в область тени – дифрагируют, и, поскольку *свет тоже дифрагирует, то он имеет волновую природу*. Но чтобы дифракция (например света) наблюдалась, необходимо чтобы интенсивность дифрагированных волн (света) была сопоставима с интенсивностью основного потока. Освещение таких проблем требует расчетов картины дифракции.

Для количественных расчетов распределения интенсивности дифрагированного света Френель дополнил принцип Гюйгенса принципом когерентности и интерференции вторичного излучения. *Принцип* 



Рис. 3.1

Гюйгенса – Френеля состоит в том, что источник света *S* (рис. 3.1) заменяется светящейся, излучающей поверхностью, каждая точка которой является источником вторичных сферических (в однородной изотропной среде) когерентных волн. Вторичное излучение посылается максимально в направлении волновой нормали *n*, а по касательной и обратно оно

отсутствует (см. угловую диаграмму распределения интенсивности излучения на рис. 3.1). Распределение интенсивности дифрагированного света рассчитывается как результат интерференции вторичных волн, пришедших в исследуемую точку (*P* на рис. 3.1).

На практике в качестве светящейся поверхности выбирают сферическую (или плоскую) волновую поверхность или ее открытые части. В таком случае все точки светящейся поверхности дают вторичное излучение с одинаковой начальной фазой.

Сферическая волна  $\xi_p$ , что приходит в исследуемую точку сложным образом, зависит от многих факторов:

$$\xi_p = \int_{s} \frac{\frac{\partial A_0}{\partial s} ds}{r} \cos\left(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}\right),$$

где  $A_0$  – амплитуда колебаний на светящейся поверхности;

ds – площадь элемента поверхности;

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$$
 – волновой вектор;

 $\vec{n}$  – волновая нормаль (см. рис. 3.1);

 $\lambda$  – длина волны;

*r* – радиус-вектор исследуемой точки;

 $\vec{k} \cdot \vec{r} = kr \cos \alpha$  – скалярное произведение волнового вектора и волновой нормали;

α – угол между ними.

Все эти величины зависят от положения точки на поверхности, поэтому Интеграл достаточно сложен и обсчитывается он в аналитиче-



ском виде только для полностью открытой волновой поверхности сферической формы. Для упрощения расчетов используются приближенные методы, наиболее известным и простым из которых является метод зон Френеля (рис. 3.2).

Чтобы вычислить амплитуду колебаний и, как следствие, интенсивность света, приходящих в исследуемую

точку, светящуюся поверхность (ВП, рис. 3.2) разбивают на кольцевые зоны таким образом, чтобы расстояние до каждой последующей зоны увеличивалось на половину длины волны (рис. 3.2). Зоны Френеля на волновой поверхности имеют форму колец, границы которых удалены от исследуемой точки P экрана наблюдения E на расстояниях,

$$b_m = b + m \frac{\lambda}{2}$$
, где  $m = 1, 2, 3, ...$ 

В таком случае действие предыдущей зоны компенсируется действием следующей, потому что каждому лучу одной зоны найдется луч в следующей, что будет с ним в противофазе и гасит его. Таким образом, для расчета амплитуды света, пришедшего в исследуемую точку, имеем соотношение:

$$A = A_1 - A_2 + A_3 - \dots - (-1)^N A_N,$$
(3.1)

где  $A_i$  – амплитуда света, пришедшего от *i*-й зоны Френеля.

Радиус *т*-й зоны Френеля (см. рис. 3.2):

$$r_m = \sqrt{\frac{ab}{a+b}} m\lambda. \tag{3.2}$$

Если фронт волны плоский, т. е.  $a \rightarrow \infty$ , радиус *m*-й зоны Френеля

$$r_m = \sqrt{mb\lambda}.$$
 (3.3)

Амплитуда света  $A_m$  зависит от площади зоны, от расстояния  $b_m$ , от угла ссылки лучей в исследуемую точку. Можно доказать, что при малых номерах зон m площадь зон Френеля примерно одинакова и не зависит от номера. В этих условиях угол ссылки лучей примерно равен нулю, поэтому амплитуды света, приходящего от зон, как это более тщательно доказал Френель, зависят только от расстояния  $b_m$  и уменьшаются по линейному закону, как члены арифметической прогрессии. Если количество зон Френеля велико  $N \to \infty$ , то  $A_N \to 0$ . Воспользовавшись законами арифметической прогрессии, соотношение (3.1) можно записать так:

$$A = \frac{A_1}{2} + \left(\frac{A_1}{2} - A_2 + \frac{A_3}{2}\right) + \left(\frac{A_3}{2} - A_4 + \frac{A_5}{2}\right) + \dots + \left(-1\right)^{N+1} \frac{A_N}{2}.$$

Так как полусумма крайних членов прогрессии равна среднему члену прогрессии, имеем:

$$A = \frac{A_{\rm I}}{2} + \left(-1\right)^{N+1} \frac{A_{\rm N}}{2}.$$
(3.4)

Если N – четное, имеем погашение лучей и минимум интерференции, а если нечетное, то имеем максимум и усиление света. Если закрыть все четные (или нечетные) зоны, получим так называемую зонную пластинку, которая дает усиление света (см. формулу (3.1)). Вся открытая волновая поверхность действует как половина первой зоны Френеля. Такой вывод следует из формулы (3.3), если учесть, что вся открытая волновая поверхность насчитывает множество зон Френеля и для зоны с номером  $N \to \infty$  амплитуда  $A_N \to 0$ . Опыт подтверждает полученные результаты, что свидетельствует в пользу применения метода для расчета картины дифракции.

Тот факт, что вся открытая волновая поверхность дает тот же результат, что и половина первой не перекрытой зоны Френеля, *объясняет прямолинейность распространения света*.

Имея результаты исследования по методу Френеля, можно выяснить условия наблюдения дифракции. Дифракция наблюдается, если количество зон Френеля в пределах оптической неоднородности невелико; его размеры должны быть сопоставимы с размерами центральной зоны Френеля. Чтобы иметь представление об этих размерах, сделаем расчеты для радиуса центральной зоны [см. формулу (3.2)] в лабораторных условиях, когда  $a \approx b \approx 1$  м, а длина волны света 0,5 мкм:

 $r_1 = \sqrt{1 \frac{1 \cdot 1}{1 + 1}} 0, 5 \cdot 10^{-6} = 0, 5 \cdot 10^{-3} \text{ м} = 0, 5 \text{ мм.}$  Если расстояния большие,

то зоны значительно больше, например, на расстоянии Луны радиус центральной зоны Френеля равен примерно 12 м.

#### 3.2. Дифракция Френеля от круглого отверстия в диафрагме и от круглого экрана. Светлое пятно Пуассона

Дифракция, рассматриваемая в сходящихся лучах, называется дифракцией Френеля.

Дифракция Френеля от круглого отверстия в диафрагме. Используется точечный источник света S, находящийся на расстоянии a от поверхности диафрагмы с круглым отверстием. Картина дифракции рассматривается на экране E, параллельном поверхности диафрагмы на расстоянии b от нее (рис. 3.3).

Пока экран расположен близко к диафрагме, расстояние *b* стремится к нулю, зоны Френеля малы, их количество, размещаемое в пределах отверстия, большое, и свет распространяется прямолинейно – изображение отверстия на экране четкое, дифракция отсутствует. Увеличивая расстояние *b*, увеличиваем размеры зон Френеля и уменьшаем их количество в пределах отверстия. На некотором расстоянии  $b_1$  дифракция станет видимой, а если в пределах отверстия поместится четное число зон Френеля, в центре экрана будет наблюдаться темное дифракционное пятно (позиция экрана  $E_1$  на рис. 3.3). Для точек экра-

на за пределами оси симметрии картины зоны Френеля будут открыты только частично, поэтому дифракционные максимумы будут изменяться минимумами, а затем снова максимумами, как схематично показано на графике распределения интенсивности дифрагированного света и дифракционных колец на экране  $E_1$ . Отдаление экрана приводит к увеличению размеров зон и на некотором расстоянии  $b_2$  количество зон, разместившихся в пределах проема, станет нечетным, и в центре экрана возникнет светлое интерференционное поле, т. е. наблюдается интерференционный максимум.



Рис. 3.3

Светлое пятно сменится темным дифракционным кольцом и т. д., как это показано на экране  $E_2$ , что на рис. 3.3. Конечно, указанные на рис. 3.3 расстояния не соответствуют реальным и размеры дифракционных картин существенно преувеличены. Чтобы иметь дифракционную картину для отверстия порядка 1 мм, необходимо иметь размеры  $a \ u \ b$  порядка сотен метров.

Дифракция Френеля от круглого экрана (рис. 3.4). Непрозрачный круглый экран E находится на расстоянии a от источника света S. Экран наблюдения перемещается в направлении от экрана. Пока экран наблюдения близко возле исследуемого экрана E, в его пределах размещается большое количество зон Френеля – свет распространяется прямолинейно и на экране наблюдения четкая круглая тень. По мере удаления экрана, когда количество зон, размещаемых в пределах экрана E, становится небольшим, дифракция наблюдается, и в центре дифракционной картины появится светлое пятно – так называемое светлое **пятно Пуассона**.





Увеличение расстояния *b* приводит к тому, что светлое пятно Пуассона становится более четким, оставаясь в центре дифракционной картины. Исходя из соображений симметрии, светлое пятно будет окружено темным и светлыми дифракционными кольцами.

#### 3.3. Дифракция Фраунгофера. Роль линзы в наблюдении дифракционной картины. Таутохронизм оптических систем. Дифракция от щели и двух щелей между полуплоскостями

Фраунгофер наблюдал картину дифракции с помощью зрительной трубы. Типичное расположение приборов при наблюдении дифракции Фраунгофера приведено на рис. 3.5. Источник света S вместе с конденсорной линзой ЛК создает параллельный поток света, распространяющийся вдоль оси коллиматора SO. Интерференционная картина дифрагированных лучей наблюдается с помощью зрительной трубы (ЗТ) под некоторым углом  $\varphi$ . Труба перемещаются вдоль линейки со шкалой  $\Gamma$  (гониометр). Параллельные лучи собираются в фокальной плоскости оптической системы зрительной трубы, где дают картину интерференции. Таким образом, в отличие от дифракции Френеля, дифракция Фраунгофера – это дифракция в параллельных лучах.



Рис. 3.5

Рассмотрим *дифракцию Фраунгофера от прямолинейной щели* между двух полуплоскостей. Типичное расположение элементов для наблюдения этой дифракции изображено на рис. 3.6.



Рис. 3.6

Наблюдение картины дифракции происходит на экране E, расположенном в фокальной плоскости линзы Л. По принципу Гюйгенса – Френеля источником вторичного излучения является поверхность щели (см. рис. 3.6). Линза собирает параллельные пучки лучей в некоторых точках фокальной плоскости. Например лучи, принадлежащие пучку, параллельному оптической оси CP (см. рис. 3.6), собираются в точке P экрана E. Для оптических систем характерным является свойство собирать плоский фронт (его сечением в плоскости рисунка является прямая AB) в одной точке, не внося вспомогательной оптической разности хода лучей – это так называемый *таутохронизм оптической ских систем*. От положения плоского фронта AB до точки его изображения P на экране лучи идут одинаковое время; по таутохронным путям. Оптическая разность хода лучей  $\Delta$  возникает до положения фронта, принадлежащего данному пучку.

Для расчета дифракционной картины поверхность щели разобьем на зоны Френеля, отсчитывая расстояние от некоторой плоскости, параллельной *AB*. Расстояние до каждой следующей зоны увеличивается на  $\lambda/2$ , поэтому общее количество зон, содержащихся в пределах щели, определится как  $m = \frac{\Delta}{\lambda/2}$ , где  $\Delta = a \sin \varphi$  (см. рис. 3.6). Если m = 2k,

72 т. е. щель содержит четное количество зон, то под данным углом имеем минимум интерференции дифрагированных лучей. Если *m* нечетное и m = 2k - 1, имеет место максимум интерференции дифрагированных лучей. Таким образом, на экране будет последовательность максиму-

мов и минимумов интенсивности света при условиях, что

максимумы

$$a\sin\varphi = (2k-1)\frac{\lambda}{2}; k = 1, 2, 3, \dots$$
 (3.5)

и минимумы

$$a\sin\phi = 2k\frac{\lambda}{2} = k\lambda; k = 1, 2, 3, \dots$$
 (3.6)

График распределения интенсивности света І приведен на рис. 3.7.



Если рассмотреть дифракцию Френеля от двух параллельных щелей шириной a, разделенных между собой промежутком b (рис. 3.8), то для расчета распределения интенсивности дифрагированного света на экране можно воспользоваться симметрией распространяемых вторичных лучей. Действительно, каждой точке первой щели найдется ей **подходящая точка** на расстоянии a + b от нее. Лучи, идущие от соответствующих точек под заданным углом, называются **соответствующих** точке под заданным углом, называются **соответствующие** лучи друга в исследуемой точке P, то и остальные соответствующие лучи также усилятся в этой точке и действие второй щели в целом усилит действие первой. Таким образом, для расчета картины дифракции достаточно рассчитать действие двух соответствующих лучей. Для этого достаточно знать их *оптическую разницу хода* и сопоставить ее с условиями максимумов и минимумов интерференции.

Из рис. 3.8 видно, что оптическая разность хода двух соответствующих лучей (которая отсчитывается от положения плоского фронта) равна:  $\Delta = (a+b)\sin\varphi$ . Таким образом, на экране возникнет интерференционная картина дифрагированного света, соответствующая условиям:

максимумов

$$(a+b)\sin\varphi = k\lambda \tag{3.7}$$

и минимумов

$$(a+b)\sin\varphi = (2k-1)\frac{\lambda}{2}$$
(3.8)

интенсивности. Картина качественно подобна той, что изображена на рис. 3.7, но количественно она принципиально отличается от дифракции на одной щели: условие для максимумов (3.7) соответствует условию минимумов для дифракции на одной щели (3.6).



Рис. 3.8

#### 3.4. Дифракционная решетка. Формула решетки. Характеристики дифракционной решетки как спектрального устройства

**Дифракционной решеткой** в узком понимании называют последовательность большого количества регулярно расположенных щелей (канавок, выступов, царапин), нанесенных тем или иным средством на плоскую (рис. 3.9) или вогнутую поверхность, которая используется для разложения света в спектр. Повторяющиеся размеры элемента называются периодом или постоянной решеткой (*d* на рис. 3.9).



Рис. 3.9

Качественные решетки изготавливаются путем нанесения рисок царапин с помощью алмазного инструмента, например, на кварцевом стекле, количеством порядка 500 царапин на 1 мм, т. е. *период* такой *решетки* d = 1 / 500 мм = 0,002 мм. Для менее подходящих целей используются решетки, являющиеся их отпечатком на специальных полимерных пластинках.

В более широком смысле *дифракционная решетка* – это регулярная последовательность оптических неоднородностей. Решетки могут быть отбивные и прозрачные; линейные, двухмерные или объемные (трехмерные).

Познакомимся с теорией наиболее простой плоской линейной, или одномерной прозрачной решетки (рис. 3.9), т. е. решетки, представляющей собой плоскую прозрачную пластинку, на которой регулярно нанесены параллельные черточки-царапины.

В элементарной теории исходим из того, что свет падает перпендикулярно на поверхность решетки, т. е. поверхность решетки является одной из волновых поверхностей. Светящаяся поверхность в таком случае определяется поверхностями щелей решетки между черточками (рис. 3.10). По принципу Гюйгенса – Френеля каждая точка всех щелей посылает свет по всем направлениям (рис. 3.10). Дифракционная картина наблюдается на экране *E*, находящемся в фокальной плоскости, собирающей линзы Л.

Это дифракция в параллельных лучах, или дифракция Фраунгофера. Как и в случае двух щелей, картина распределения интенсивности рассчитывается с учетом симметрии хода лучей.



Рис. 3.10

Положение основных максимумов определяется по формуле (3.8), в которой a + b = d, т. е. это **постоянная решетки**. Формула

$$d\sin\varphi = k\lambda$$
  $k = 0, 1, 2, 3, ...$  (3.9)

называется формулой дифракционной решетки, она определяет положение основных максимумов интенсивности света на экране наблюдения (рис. 3.11). Но, благодаря наличию периодичности через одну, через две и т. д. щелей, наряду с основными появляются вспомогательные максимумы и минимумы интенсивности.



Рис. 3.11

Как указывает более подробная теория для решетки, имеющей N щелей, между двумя основными максимумами возникает N - 1 дополнительных минимумов и соответствующее количество максимумов (см. рис. 3.11). Интенсивность I дополнительных максимумов значительно меньше интенсивности основных максимумов и роль их сводится к тому, что они делают основные максимумы более узкими, более острыми.

Из формулы решетки (3.9) видно, что в случае освещения решетки белым и вообще сложным светом для каждой длины волны  $\lambda_k$  существуют свои углы  $\varphi_k$  (см. рис. 3.10), под которыми наблюдаются интерференционные максимумы. Это значит, что сложный свет, проходящий через решетку и дифрагирующий, собирается параллельными пучками в соответствующих точках линзы Л, а если для данной точки выполняется условие формулы решетки (3.11), то в ней наблюдается максимум *k*-го порядка длины волны  $\lambda$  – свет разложится в спектр. На рис 3.12 приведен график распределения интенсивности света *I* на экране, соответствующий двум длинам волн  $\lambda_1 < \lambda_2$ . Под графиком изображены спектры *k*-ых порядков в виде прямоугольников и под ними обозначены красная (кр) и фиолетовая (ф) части спектров. В центре наблюдаются максимумы всех длин волн (см. формулу (3.9); *k* = 0), поэтому имеем белую полосу.



Рис. 3.12

Благодаря способности дифракционной решетки разлагать сложный свет в спектр, ее используют как основной элемент спектрографических приборов. Как спектрографический прибор дифракционная решетка характеризуется такими величинами, как угловая и линейная дисперсии и разрешающая способность.

Дисперсия характеризует способность решетки пространственно растягивать единичный интервал длин волн спектра: угловая – на диапазон углов:

$$D\varphi = \frac{d\varphi}{d\lambda} = \frac{k}{d\cos\varphi};$$
(3.10)

линейная – на диапазон линейных размеров на экране:

$$D_l = \frac{dl}{d\lambda} = D_{\varphi}F = F\frac{k}{d\cos\varphi}.$$
(3.11)

Формулы (3.9) и (3.10) очевидны, если исходить из формулы решетки (3.9) и из того факта, что экран находится на фокальном расстоянии от линзы (см. рис. 3.10), т. е. что  $dl = Fd\varphi$ . Но основной характеристикой спектрографического прибора является его разрешение:

$$R = \frac{\lambda}{\Delta \lambda} = \frac{\lambda}{\lambda_2 - \lambda_1},\tag{3.12}$$

где λ<sub>1</sub> и λ<sub>2</sub> – длины волн, которые все еще видны как отдельные спектральные линии (формула 3.12);

 λ – длина волны, для которой определяется дисперсия (один из двух или их среднее арифметическое).

По критерию Рэлея спектральные линии разделяются как отдельные линии, если спектральный максимум одной линии не ближе минимума другой (рис. 3.13). На этом рисунке общая интенсивность *I* двух линий изображена пунктирной линией. Обращает на себя внимание факт, что разрешение решетки в основном зависит от общего количества щелей в ней.



Рис. 3.13
# 3.5. Дифракция рентгеновского излучения на пространственной решетке. Формула Вульфа – Брэгга

Изучение дифракции на объемной дифракционной решетке для электромагнитного излучения светового диапазона требует дифракционной решетки с периодом порядка одного микрометра. Искусственное изготовление такой объемной дифракционной решетки сопряжено с техническими трудностями. Но природа сама приготовила объемную решетку с периодом порядка 10<sup>-10</sup> м. Такой решеткой являются кристаллы, и такая решетка сопоставима с длиной волн рентгеновского диапазона. Волны видимого диапазона воспринимают кристалл как сплошную среду. Следовательно, дифракция на объемной дифракционной решетке – это дифракция рентгеновского излучения.

Характерной особенностью рентгеновского излучения является его высокая проницаемость в вещество и отсутствие преломления (показатель преломления для них  $n \cong 1$ ). Рассмотрим дифракцию на идеальном кристалле, в котором атомы расположены регулярно, создавая равноудаленные, на расстояниях d, атомные плоскости (рис. 3.14).



Рис. 3.14

Узлы кристаллической решетки становятся центрами вторичного когерентного излучения. Оптическая разница хода между лучами дифрагированными под такими же углами, как и угол скольжения  $\alpha \Delta = 2 \sin \alpha$ . Соответственно дифракционные максимумы наблюдаются при условии:

$$2d\sin\alpha = k\lambda. \tag{3.13}$$

Формула (3.13) известна как закон Вульфа-Брэгга, который лежит в основе рентгенографии, т. е. направления в экспериментальных исследованиях структуры кристаллов на основании изучения дифракцион-

ной картины прохождения или отражения рентгеновских лучей для исследуемого кристалла. Типичная дифракционная картина представлена на рис. 3.15, где изучался кристалл цинковой обманки (ZnS).





Рис. 3.15

# Тема 4. ПОЛЯРИЗАЦИЯ СВЕТА

4.1. Поляризация волн. Виды поляризации. Закон Малюса.

4.2. Поляризация света при прохождении границы раздела двух прозрачных диэлектриков. Закон Брюстера. Стопа Столетова.

4.3. Поляризация света в оптически анизотропных средах. Двойное лучепреломление. Призма Николя. Дихроизм. Поляроиды.

4.4. Интерференция поляризованного света. Цвета тонких кристаллических пластинок.

4.5. Искусственная оптическая анизотропия. Анализ упругих деформаций. Эффект Керра.

#### 4.1. Поляризация волн. Виды поляризации. Закон Малюса

В волновом процессе, т. е. в процессе распространения колебаний, есть два характерных направления: направление колебаний и направление их распространения. Если эти направления совпадают, то волны называют *продольными*, а если они являются взаимно перпендикулярными, то волны – *поперечные*. Поскольку в *поперечных волнах* выделены направление колебаний и плоскость колебаний (плоскость, проведенная через направление колебаний и направление распространения), поперечные волны можно поляризовать. Поляризацией называется явление организации колебаний в волновом процессе. В реальной поперечной волне колебания могут происходить в различных направлениях (перпендикулярные направления к направлению распространения многочисленны), и явление поляризации заключается в преобразовании такого неорганизованного волнового процесса в волну с одним направлением колебаний. Волна, поляризованная таким образом, называется линейно-, или плоскополяризованной, а устройство, выполняющее такое преобразование, называется поляризатором.

Если наложены два волновых плоскополяризованных когерентных процесса, колебания, в которых являются взаимно перпендикулярными, то результатом сложения таких колебаний, как известно, является эллипс, который в волновом процессе смещается со скоростью волны – возникает эллиптически-поляризованная волна. Такая волна может быть изображена графически в виде эллиптической спирали. Конечно, основным типом поляризации волн является линейная поляризация.

Волновая оптика рассматривает свет как электромагнитные поперечные волны, как процесс распространения колебаний *светового вектора* (см. п. 2.2), поэтому свет должен поляризоваться, что и подтверждает опыт. Поляризацией света, таким образом, является процесс организации колебаний светового вектора.

Исходя из того, что свет, посылаемый солнцем, раскаленными телами и другими источниками, является результатом несогласованного излучения множества атомов, то направления колебаний светового вектора в нем с равной вероятностью представлены во всех направлениях. Такой свет называется обычным. В линейно-поляризованном свете представлены колебания только одного направления, т. е. можно сказать, что поляризация света заключается также в преобразовании естественного света в поляризованный.

Графическое изображение обычного и линейно-поляризованного света приведено на рис. 4.1. Здесь изображен неполяризованный обычный свет – a, b, e и поляризованный – c, d, e, w. В свете с поляризацией, изображенной на рис 4.1, e, световой вектор имеет колючую, а на рис. 4.1, w – гладкие компоненты.



Рис. 4.1

Как известно, поляризация, в том числе и поляризация света, происходит с помощью устройств, носящих название *поляризаторов*. *Поляризатор* пропускает свет с одним направлением колебаний и полностью задерживает колебания в перпендикулярном направлении.



Если колебания происходят в направлением пропускания (рис. 4.2), то их можно разложить на параллельную  $A_{II} = A \cos \varphi$  и перпендикулярную  $A_{\perp} = A \sin \varphi$  составляющие. Первые колебания проходят через поляризатор, а вторые полностью задерживаются им. Интенсивность света пропорциональна квадрату

амплитуды, поэтому интенсивность поляризованного света, прошедшего через поляризатор, в данном случае называется *анализатором*,  $I_a \sim (A_{\rm II})^2 = A^2 \cos^2 \varphi \sim I_{\rm II} \cos^2 \varphi$ .

Соотношение

$$I_{\rm a} = I_{\rm m} \cos^2 \varphi \tag{4.1}$$

называется законом Малюса: интенсивность поляризованного света, прошедшего через анализатор, направление пропускания которого составляет угол  $\varphi$  к направлению колебаний света, равна произведению интенсивности света на квадрат косинуса угла между этими направлениями.

Если на поляризатор падает обычный свет, то в нем представлены колебания произвольных направлений и  $0 \le \varphi \le 2\pi$ , следовательно, интенсивность света после поляризатора  $I_{\pi} = I_0 < \cos^2 \varphi > = 1/2I_0$ , где

 $<\cos^2 \phi > = 1/2$  – среднее значение квадратов косинусов углов, а  $I_0$  – интенсивность обычного света до поляризатора. Если обычный свет проходит через систему «поляризатор – анализатор» (рис. 4.3), то имеет место соотношение:



Рис. 4.3

Соотношения (4.1) и (4.2) записаны для идеальных поляризаторов. Реальные устройства имеют собственные коэффициенты поглощения и отражения, что накладывает свое влияние на упомянутые соотношения.

Явление поляризации света наблюдается при отражении от прозрачных диэлектриков и при прохождении его через прозрачные анизотропные кристаллы, т. е. через кристаллы, оптические свойства которых зависят от направления, в том числе и направления колебаний светового вектора.

# 4.2. Поляризация света при прохождении границы раздела двух прозрачных диэлектриков. Закон Брюстера. Стопа Столетова

Наблюдая прохождение света через границу раздела прозрачных диэлектриков (вода, стекло, лак и т. д.), Брюстер заметил, что отраженный и преломленный свет частично поляризованы. *Частично поляризованным* называется свет, в котором представлены колебания различных направлений, но его интенсивность зависит от направления. Если пропустить такой свет через анализатор, то при повороте анализатора вокруг направления распространения интенсивность света будет варьироваться от  $I_{\rm max}$  до  $I_{\rm min}$ . Физическая величина

$$p = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\min} + I_{\min}}$$
(4.3)

определяет степень поляризации. Брюстер показал, что степень поляризации зависит от угла падения света и, если угол между отраженным и преломленным светом составляет 90°, отраженный свет полностью поляризован (рис. 4.4).



Рис. 4.4

Колебания светового вектора в нем происходят в направлении, перпендикулярном к плоскости падения света, а преломленный свет при этом максимально поляризован с преимуществом колебаний в плоскости падения (рис. 4.4). При таком угле падения, который называется углом Брюстера,  $\gamma = 90^\circ - \beta = 90^\circ - \alpha_b$ , имеем утверждение, но-сящее название закона Брюстера:

$$n_{21} = \frac{\sin\alpha_E}{\sin\gamma} = \frac{\sin\alpha_E}{\cos\alpha_E} = \mathrm{tg}\alpha_E.$$
$$\mathrm{tg}\alpha_E = n_{21} = \frac{n_2}{n_1}, \tag{4.4}$$

где  $n_1$  и  $n_2$  – абсолютные показатели преломления света первого и второго по ходу луча сред (см. рис. 4.4).

Стопка из десяти-одиннадцати прозрачных стеклянных пластинок, расположенных под углом Брюстера к направлению распространения,

называется *стопой Столетова*. Свет, исходящий из такой системы, благодаря увеличению степени поляризации на каждой из пластинок, является практически полностью линейно-поляризованным. Стопа Столетова используется в качестве поляризатора.

# 4.3. Поляризация света в оптически анизотропных средах. Двойное лучепреломление. Призма Николя. Дихроизм. Поляроиды

Кристаллы, оптические свойства которых зависят от направления, в том числе и направления колебаний светового вектора, называются оптически анизотропными. Прохождение света через оптически анизотропные среды сопровождается явлением двойного лучепреломления. Оптическую анизотропию имеют все прозрачные кристаллы, кроме кристаллов кубической симметрии типа кристаллов NaCl. Световой поток, падающий на такой кристалл, разделяется в нем на два потока. Один из них подчиняется законам геометрической оптики и называется обыкновенным, другой не подчиняется этим законам и называется необыкновенным. Обыкновенные лучи не принадлежат плоскости падения, их показатель преломления зависит от направления колебаний и изменяется при повороте кристалла вокруг направления падения света. В кристалле существует одно или два направления, в которых двойное преломление отсутствует. Эти направления определяют главные оптические оси кристаллов. Соответственно кристаллы могут быть одноосные или двухосные. В двухосном кристалле оба световых потока необыкновенные. Плоскость, которую определяют падающий луч и направление главной оптической оси, проведенной в точке падения, называют главной оптической плоскостью кристалла.

Оба световых потока полностью линейно поляризованы во взаимно-перпендикулярных направлениях: необычный световой поток имеет колебания светового вектора в главной оптической плоскости, а обычный – в направлении, перпендикулярном к ней. Эти потоки могут идти разными или даже одинаковыми путями, но с разными скоростями. Если один из этих потоков отделить, то можно получить линейнополяризованный свет.

Для выделения одного из световых потоков и получения поляризованного света используются искусственные приемы. Например, *криствалл исландского шпата* имеет показатели преломления соответственно для обыкновенного светового потока  $n_0 = 1,658$ , необыкновенный световой поток меняет свой показатель преломления  $n_e$  в зависи-

мости от направления колебаний в пределах от 1,486 до 1,658. Кристалл исландского шпата разрезают под определенным углом (рис. 4.5), а после этого склеивают так называемым канадским бальзамом с показателем преломления  $n_5 = 1,550$ . Канадский бальзам является оптически менее плотной средой для обыкновенного потока ( $n_o > n_6$ ) и оптически более плотным для необыкновенного ( $n_e = 1,486 < n_6 = 1,550$ ). Свет направляется на склеенный разрез под такими углами, что обыкновенный свет, получая полное внутреннее отражение, поглощается затемненной поверхностью кристалла, а необыкновенный поляризованный свет выходит из призмы. Такая поляризующая призма называется **призмой Николя**, или просто **николь**. Существуют и другие поляризующие призмы.



Рис. 4.5

Существуют кристаллы, в которых обычный световой поток поглощается значительно интенсивнее, чем необычный, это *явление дихроизма*. Кристалл, толщина которого составляет доли миллиметра, полностью поглощает обыкновенный поток, а на выходе имеем свет полностью линейно-поляризованный (имеющий окраску, характерную для данного кристалла), т. е. выделение необычного потока происходит естественно. Явление дихроизма является характерным для кристаллов турмалина (свет получается зеленоватого оттенка), йодистого хинина (коричневого), герапатита (черный оттенок) и др. Мелкие кристаллики таких веществ напыляют с определенной ориентацией оптических осей на полимерные пленки, которые используются как поляризаторы и называются *поляроидами (поляроидными пленками)*.

#### 4.4. Интерференция поляризованного света. Цвета тонких кристаллических пластинок

Обыкновенный и необыкновенный световые потоки некогерентны, потому что были получены в результате колебаний различных групп атомов. При выходе из кристалла эти разделенные некогерентные

накладываемые световые потоки дают вновь неполяризованный свет. Но, если на кристалл падает поляризованный свет, то оба световых потока будут когерентными, а на выходе из кристалла при их смешивании получим эллиптически-поляризованный свет. Поляризация такого света может варьироваться от циркулярной (поляризация по окружности) до линейной (когда эллипс вырождается в прямую линию), в зависимости от толщины слоя, пройденного светом в кристалле, т. е. в зависимости от сдвига фаз и оптической разности хода лучей. Соответственно, кристаллическая пластинка с оптической разницей хода лучей  $\Delta = \lambda/4$  (сдвиг фаз  $\Delta \phi = \pi/2$ ) дает циркулярнополяризованный свет и носит название пластинка в четверть волны. Пластинка в половину длины волны, соответственно, имеет  $\Delta \phi = \pi$  и  $\Delta$  $= \lambda/2$  и дает линейно-поляризованный свет с направлением колебаний в 45° к главной оптической плоскости. Поляризатор (анализатор), поставленный на пути такого света, пропустит колебания двух когерентных световых потоков с оптической разностью хода лучей, зависящей от толщины кристаллической пластинки. Колебания будут происходить в одном направлении, что определяется анализатором и за ним будет наблюдаться интерференционная картина, цвет которой зависит от оптической разности хода, т. е. от толщины пластинки – имеем цвета тонких пластинок. Полученная интерференционная картина может зависеть также от оптических неоднородностей структуры кристалла, в таком случае расшифровка оптической картины даст возможность делать выводы о структурных особенностях материала кристалла.

# 4.5. Искусственная оптическая анизотропия. Анализ упругих деформаций. Эффект Керра

Оптическая изотропия материалов, состоящих из анизотропных молекул, является статистической и может быть нарушена искусственно. Например, прозрачные твердые полимерные материалы состоят из анизотропных молекул и имеют статистическую оптическую изотропию, т. е. свет при прохождении через них не имеет двойного лучепреломления. Но при наложении механических нагрузок материалы деформируются, статистическая изотропия материала нарушается, он становится оптически анизотропным. При прохождении через такой нагруженный материал свет имеет двойное лучепреломление и, если его поставить между анализатором и поляризатором, возникнет интерференционная картина, подчиняющаяся так называемому закону Вертгейма:

$$\Delta = k\lambda = D(\sigma_1 - \sigma_2)d, \qquad (4.5)$$

где  $\sigma_1 - \sigma_2$  – разница главных значений напряжений, возникающих в плоскости, перпендикулярной направлению распространения света:

λ – длина волн используемого света;

*k* – количество интерференционных полос;

*D* – цена одной оптической полосы;

*d* – толщина материала по ходу лучей света.

Из анализа интерференционной картины по закону (4.5) можно делать выводы о напряжениях в материале. Приведенный эффект используется для моделирования и изучения напряженного состояния в деталях машин и механизмов или, например, для анализа распределения напряжений в плотине под действием давления воды.

Оптическая анизотропия жидких и газообразных материалов, состоящих из анизотропных молекул, может достигаться созданием в них направленных движений, течений и т. д. либо под действием электрических полей. Созданием оптической анизотропии и изучением интерференционной картины занимался шотландский физик Джон Керр. Он экспериментально установил (эффект Керра), что для монохроматического света данной длины волны  $\lambda$  разница показателей преломления света  $n_e - n_o$  пропорциональна квадрату напряженности поля и, соответственно, получаемая разница хода лучей:

$$\Delta = m\lambda = (n_e - n_o)d = kdE^2, \qquad (4.6)$$

где *E* – напряженность поля, перпендикулярная направлению распространения света;

k – постоянная Керра;

*d* – толщина слоя жидкости.

*Ячейки Керра* (рис. 4.6) используются в качестве быстродействующих оптических затворов для съемок скоротечных процессов, в опытах по определению скорости света в условиях лаборатории. На рис. 4.6 *S* – источник света;  $N_1$  и  $N_2$  – поляризаторы, расположенные таким образом, что не пропускают поляризованный свет; К – сосуд с нитроглицерином, в котором размещен конденсатор для создания электрического поля.

Тот факт, что оптическая разность хода лучей пропорциональна квадрату напряженности электрического поля (см. формулу (4.5)) используется для преобразования, например, колебаний напряженности электрического поля звуковой частоты в колебания интенсивности света и его записи на кинопленку.



Рис. 4.6

Этот эффект использовался для записи звука на кинопленку. При восстановлении звука световой сигнал, проходя через пленку, попадал на фотоэлемент, где снова оптическая запись превращалась в электрическую с последующим звуковым воспроизведением.

### Тема 5. ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

5.1. Виды электромагнитного излучения. Тепловое излучение. Равновесность теплового излучения. Характеристики теплового излучения и их взаимосвязь.

5.2. Законы теплового излучения. Универсальная функция Кирхгофа. Абсолютно черное и серое тело.

5.3. Элементы теории теплового излучения. Гипотеза и формула Планка.

5.4. Понятие об оптической пирометрии.

#### 5.1. Виды электромагнитного излучения. Тепловое излучение. Равновесность теплового излучения. Характеристики теплового излучения и их взаимосвязь

Электромагнитное излучение переносит с собой энергию излучающего тела. Для того чтобы излучение было устойчивым во времени, потерянная энергия должна пополняться. Вид источника энергии, за счет которого происходит излучение, определяет природу электромагнитного излучения и по договоренности дает ему название.

**Тепловым излучением** называется электромагнитное излучение, которое происходит за счет хаотического, теплового движения молекул вещества. Физическая природа такого процесса заключается в преобразовании энергии теплового движения молекул и атомов вещества в энергию электромагнитного излучения. Если источником энергии излучения являются другие виды энергии, их принято называть *люми*- *несценциями* (*luminis* – свет и *escent* – суффикс, означающий слабое действие). Конкретный вид люминесценции зависит от источника энергии, за счет которой оно существует: электролюминисценция – это электромагнитное излучение за счет энергии электрического поля (свечение газовых ламп, например); биолюминесценция – это свечение за счет биологической энергии, например, светлячков; хемилюминесценция – за счет химической энергии и т. д.

Особенность тепловой энергии заключается в том, что все виды энергии могут полностью превращаться в тепловую, для других видов это запрещено вторым законом термодинамики – в процессе преобразования часть энергии обязательно перейдет в тепловую. Эта особенность приводит к тому, что только тепловое излучение является **равновесным**, т. е. между излучающим телом и излучением может установиться динамическое равновесие. Действительно, рассмотрим некоторую адиабатическую замкнутую зеркальную полость (рис. 5.1), в которой есть некоторое тело (A на рис. 5.1). Если температура тела выше абсолютного нуля, оно будет давать тепловое излучение. В процессе излучения тело теряет часть своей энергии и охлаждается, но излучение будет заполнять собой полость, отражаться стенками и частично попадать на тело, где оно будет поглощаться и пополнять энергию теплового движения молекул. В конце концов наступит динамическое равновесие между энергией, которая излучается и поглощается. В случае равновесия телу и излучению приписывается одинаковая температура, поэтому равновесное излучение называется также температура ным.



Рис. 5.1

Для исследования равновесных процессов может быть использован термодинамический метод. Основные характеристики исследуемого процесса в таком случае являются энергетическими.

1. Энергетический поток  $\Phi$  – это физическая величина, определяемая мощностью излучения со всей поверхности излучателя, по всем направлениям и во всем диапазоне длин волн.

2. Энергетическая светимость, или интегральная излучающая способность – это физическая величина, равная энергетическому потоку из единицы поверхности излучателя, это мощность излучения из единицы поверхности во всех направлениях и во всем диапазоне длин волн. Следовательно, это интегральная (по диапазону излучения), но локальная (для данной точки поверхности излучателя) характеристика:

$$R_e = \frac{W}{St} = \frac{P}{S} , \qquad (5.1)$$

если излучение происходит равномерно во времени и с поверхности

$$R_e = \frac{d^2 W}{dSdt} = \frac{dP}{dS}; \quad \left[R_e\right] = \frac{B_{\rm T}}{M^2}.$$
 (5.2)

3. Спектральная плотность энергетической светимости (спектральная излучающая способность) – это физическая величина, определяющая распределение энергетической светимости по спектру излучения:

$$r_{\lambda,T} = \frac{dR_e}{d\lambda}; \quad r_{\nu,T} = \frac{dR_e}{d\nu}; \quad r_{\omega,T} = \frac{dR_e}{d\omega},$$
 (5.3)

где нижние индексы указывают, от чего зависит соответствующая характеристика. Все характеристики взаимосвязаны:

$$dR_e = r_{\lambda,T} d\lambda = r_{\nu,T} d\nu = r_{\omega,T} d\omega \Longrightarrow R_e = \int_0^\infty r_{\lambda,T} d\lambda = \dots, (5.4)$$

кроме этого,

$$r_{\nu,T} = r_{\lambda,T} \frac{d\lambda}{d\nu} = \left(\lambda = \frac{c}{\nu}\right) = r_{\lambda,T} \frac{c}{\nu^2}$$
(5.5)

и т. д.

Уравнение (5.5) записано с точностью до знака.

4. *Поглощающие способности:* интегральная

$$A_T = \frac{\Phi'}{\Phi} \tag{5.6}$$

и спектральная

$$a_{\lambda,T} = \frac{d\Phi'_{\lambda}}{d\Phi_{\lambda}},\tag{5.7}$$

где в числителе стоят части потока, поглощаемые соответственно во всем диапазоне длин волн (интегральная) и в узком диапазоне волн  $d\lambda$  вблизи волны  $\lambda$  (спектральная). В знаменателях – соответствующие полные энергетические потоки, т. е. *поглощающая способность* – это судьба поглощенной энергии.

#### 5.2. Законы теплового излучения. Универсальная функция Кирхгофа. Абсолютно черное и серое тело

Основным законом теплового излучения является закон Кирхгофа, который количественно формулирует известное **правило Прево**: тела, которые не поглощают одинаково, излучают по-разному. Это значит, что тела, которые больше поглощают, больше и излучают. Закон Кирхгофа гласит, что отношение спектральной плотности энергетической светимости тела к его спектральной поглощающей способности не зависит от природы тел:

$$\left(\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}}\right)_{1} = \left(\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}}\right)_{2} = \left(\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}}\right)_{3} = \dots = f(\lambda, T), \quad (5.8)$$

где  $f(\lambda,T)$  – универсальная функция Кирхгофа. Функция универсальна в понимании ее пригодности для всех тел и она может выражаться как f(v,T) или  $f(\omega,T)$  в зависимости от использованных характеристик (см. соотношение (5.3), (5.5)).

Для построения функции Кирхгофа и для построения теории теплового излучения вводится идеализация – *абсолютно черное тело*, т. е. тело, поглощающая способность которого равна единице:

$$a_{\lambda T}^* = 1.$$
 (5.9)

Но, как это выходит из закона (5.8), для абсолютно черного тела

$$r_{\lambda T} \equiv f(\lambda, T) , \qquad (5.10)$$

т. е. спектральная плотность энергетической светимости абсолютно черного тел совпадает с универсальной функцией Кирхгофа.

Для доказательства закона Кирхгофа рассмотрим теплоизолированную систему, состоящую из двух бесконечно длинных пластин (рис. 5.2), между которыми вакуум и которые могут обмениваться электромагнитным излучением. Пусть внутренняя поверхность пластины *а* абсолютно черная, а пластина *b* – реальное тело. Через неко-





торое время установится тепловое равновесие с некоторой температурой *T*. При этом черное тело отдает с единицы поверхности энергию  $dW^* = r_{\lambda T}^* d\lambda$ , а реальное тело поглощает на единицу поверхности  $dW = adW^* = ar_{\lambda T}^* d\lambda$ , но чтобы воссоздалось тепловое равновесие, реальное тело должно столько же и излучать:

$$dW = r_{\lambda T} d\lambda = a_{\lambda T} r_{\lambda T} d\lambda. \qquad (5.11)$$

Из уравнения (5.11) следует закон Кирхгофа:

$$\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} = r_{\lambda T}^* = f(\lambda, T).$$
(5.12)

Введение абсолютно черного тела дает возможность построить функцию Кирхгофа, если иметь модель абсолютно черного тела и теоретически и экспериментально.

Модель абсолютно черного тела представляет собой полое тело с отверстием, не превышающим одной десятой его внутренних размеров. Излучение абсолютно черного тела, которое находится в термостате с постоянной температурой *T*, может быть исследовано с помощью спектральных приборов и приборов, измеряющих мощность излучения  $\Delta P$  в диапазоне длин волн  $\Delta \lambda$  около длины волны  $\lambda$ . Таким образом, при известном значении площади излучающей поверхности *S* были вычислены средние значения спектральных плотностей энергетической светимости  $\langle r_{\lambda r}^* \rangle = \frac{\Delta P}{S \Delta \lambda}$  и построена универсальная функция Кирхгофа, ход которой при разных температурах изображен на рис. 5.3.



Рис. 5.3

Ход этой функции подчиняется следующим законам.

1. Закон Стефана – Больцмана. Энергетическая светимость абсолютно черного тела прямо пропорциональна четвертой степени абсолютной температуры его поверхности:

$$R_e^* = \sigma T^4, \tag{5.13}$$

где  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{K}^4$  – постоянная Стефана – Больцмана.

2. Закон Вина. Длина волны, на которую приходится максимум спектральной плотности энергетической светимости абсолютно черного тела, смещается в сторону меньших длин волн с увеличением температуры тела (см. рис. 5.3), а

$$\lambda_m = \frac{b}{T},\tag{5.14}$$

где  $b = 2.9 \cdot 10^{-3}$  м · К – постоянная Вина.

3. Закон Вина – Голицына. Спектральная плотность энергетической светимости абсолютно черного тела для длины волны, соответствующей максимуму светимости, пропорциональна пятой степени абсолютной температуры излучающей поверхности абсолютно черного тела:

$$\left(r_{\lambda T}\right)_{\max} = CT^5, \qquad (5.15)$$

где С – постоянная величина.

Законы Стефана – Больцмана и Вина действительны только для абсолютно черных тел. Для реальных тел они не выполняются. Были попытки придать закону Стефана – Больцмана более общую форму

$$R_e = BT^n, (5.16)$$

где коэффициент *В* и показатель степени *n* должны быть определены экспериментально для каждого тела. Так, для вольфрама с температурой около 1000 К,

$$R_{\rho} = 5,9 \cdot 10^{-13} T^{5,35}. \tag{5.17}$$

Но наблюдения за разными температурами указывают на то, что ни коэффициент *B*, ни показатель степени *n* не остаются постоянными и при температуре около 2000 К для вольфрама  $B = 2,4 \cdot 10^{-11}$ , a n = 4,85.

#### 5.3. Элементы теории теплового излучения. Гипотеза и формула Планка

Для рассмотрения теории теплового излучения необходимо сделать теоретические предположения либо о строении абсолютно черного тела и механизме его излучения, либо о природе самого равновесного теплового излучения. На основании таких предположений, если они не противоречивы, строится функция Кирхгофа, которая должна совпадать с полученной экспериментально (см. рис. 5.3). Кроме того, полученные результаты должны соответствовать известному *термодинамическому закону Вина*. В 1893 г. немецкий физик Вильгельм Вин рассмотрел *термодина*мику процесса равновесного сжатия движущимся зеркальным поршнем теплового излучения в адиабатической зеркальной полости и получил для функции Кирхгофа выражение:

$$r_{\lambda T}^{*} = f(\lambda, T) = \frac{c^{4}}{\lambda^{5}} F\left(\frac{c}{\lambda T}\right), \qquad (5.18)$$

где  $F\left(\frac{c}{\lambda T}\right)$  – некоторая новая функция, в которую произведение  $\lambda T$ 

входит как одно целое;

с – скорость света в вакууме.

Из формулы (5.18) вытекали все экспериментальные законы теплового излучения: (5.13), (5.14) и (5.15). Выводы, полученные методами термодинамики, приравниваются к результатам экспериментов по своей достоверности, но так как эти выводы получены на общих основаниях, они не дают конкретных представлений о природе излучения и

не могут дать конкретного вида функции  $F\left(\frac{c}{\lambda T}\right)$ . Для получения этой

функции необходимы конкретные физические предположения либо о механизме излучения черного тела, либо о природе самого равновесного излучения.

В. Вин смоделировал полностью черное тело как систему гармонических классических осцилляторов, каждый из которых настроен на некоторую частоту v ( $0 < v < \infty$ ). Исходя из классического распределения энергии по частотам осцилляторов, Вин получил закон:

$$r_{\lambda T}^{*} = f(\lambda, T) = \frac{a_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{\lambda_2}{\lambda T}}},$$
 (5.19)

который согласовывался с термодинамическим законом Вина, давал хорошее совпадение в области малых длин волн (высоких частот излучения), но в области больших длин волн имел плохое соответствие с экспериментальными результатами (рис. 5.4) и, кроме того, для энергетической светимости давал бесконечное большое значение, что является абсурдом.

Другой подход предложен Дж. Рэлеем. Вин предложил рассматривать равновесное тепловое излучение в полости черного тела как совокупность стоячих электромагнитных волн частотного диапазона от нуля до бесконечности. По закону равномерного распределения энергии по степеням свободы на каждую из пучностей электромагнитного излучения приходится энергия  $\varepsilon = kT$ , т. е.  $\frac{1}{2}kT$  на электрическое поле в пучности и  $\frac{1}{2}kT$  на магнитное поле в той же пучности для данной частоты (или длины волны). Ученик Рэлея Джинс провел расчеты количества пучностей электромагнитных волн на единичный интервал длин волн для единицы объема излучения, и была получена при этом на *бесспорных с точки зрения представлениях классической физики* формула:



$$r_{\lambda T}^* = \frac{2\pi c^2}{\lambda^4} kT.$$
(5.20)

Формула Рэлея – Джинса согласуется с термодинамическим законом Вина (5.18). Действительно:  $r_{\lambda T}^* = \frac{2\pi c^2}{\lambda^5} k(\lambda T)$ , но выводы из этого закона абсурдны. Хотя для больших длин волн совпадение достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными (рис. 5.4), для коротких длин волн имеем, что чем меньше длина волны, тем больше

спектральная плотность излучающей способности черного тела, и для  $\lambda \rightarrow 0 \quad r_{\lambda T}^* \rightarrow \infty$ .

Но практика дает противоположный результат. Это катастрофическое различие выводов классической теории с практикой получило название *«ультрафиолетовая катастрофа»* – катастрофа классических представлений. По выражению одного из физиков, «уравнение классической физики оказалось не в состоянии объяснить, почему потухшая печь не излучает желтых лучей наряда с излучением больших длин волн».

Формула Планка. Около 1900 г. знаменитому немецкому физику Максу Планку удалось найти сначала чисто эмпирически формулу, которая хорошо согласовывалась с результатами опытов и в двух предельных случаях переходила соответственно для длинноволнового излучения в формулу Рэлея – Джинса (5.20), а для коротковолнового – в формулу Вина (5.19). Формула Планка имеет вид:

$$r_{\lambda T}^{*} = f(\lambda, T) = \frac{a_{1}}{\lambda^{5}} \frac{1}{e^{\frac{a_{2}}{\lambda T}} - 1}.$$
 (5.21)

Действительно, для длинных волн, где

$$\lambda T >> 1 \rightarrow e^{\frac{a_2}{\lambda T}} - 1 = 1 + \frac{a_2}{\lambda T} + \frac{1}{2!} \left(\frac{a_2}{\lambda T}\right)^2 + \dots - 1 \approx \frac{a_2}{\lambda T},$$

 $\lambda T << 1$ ,  $e^{\lambda T} >> 1$  и единицей в знаменателе формулы Планка можно пренебрегать, она перейдет в формулу Вина.

Чтобы получить формулу (5.21), Планк, как и Вин, предположил, что черное тело представляет собой совокупность гармонических осцилляторов, для равновесного излучения которых

$$r_{\lambda T}^{*} = \frac{2\pi c}{\lambda^{4}} \langle \varepsilon \rangle, \qquad (5.22)$$

где <ɛ> – среднее значение энергии осцилляторов.

Действительно, если  $<\varepsilon> = kT$ , получим формулу Рэлея – Джинса и, если осцилляторы подчиняются классическому распределению по

энергиям, то  $\langle \varepsilon \rangle = e^{-\frac{a_2}{\lambda T}}$ , имеем формулу Вина. Но для того чтобы выполнялся обязательно термодинамический закон Вина (5.18) и формула Планка (5.21), среднее значение осциллятора должно иметь вы-

ражение:  $\langle \varepsilon \rangle = \frac{cb}{\lambda \left( e^{\frac{cb}{\lambda T}} - 1 \right)}$ . Чтобы получить такое среднее значение

энергии осцилляторов, **Планк выдвинул гипотезу**, что осцилляторы должны иметь энергию целочисленно кратную некоторой порции энергии  $\varepsilon_0$ :  $\varepsilon_0$ ,  $2\varepsilon_0$ ,  $3\varepsilon_0$ ,  $4\varepsilon_0$ , ... . Из анализа соотношения для среднего значения энергии осцилляторов следует, что  $\varepsilon_0$  должна быть пропорциональной частоте излучения, т. е.

$$\varepsilon_0 = hv = \frac{hc}{\lambda},\tag{5.23}$$

где  $h = 6,64 \cdot 10^{-34}$  Дж с – современное значение коэффициента пропорциональности *b*, что носит название *постоянной* Планка;

 $\nu = \frac{c}{\lambda}$  – частота, на которую настроен осциллятор;

λ – соответствующая длина волны излучения;

с – скорость света в вакууме.

Таким образом, *гипотеза Планка* утверждает, что гармонический осциллятор может иметь энергию, целочисленно кратную частоте, на которую он настроен:

$$W = hv, 2hv, 3hv, \dots, Nhv$$
 (5.24)

Соответственно, формула Планка (5.22) принимает вид:

$$r_{\lambda T}^{*} = \frac{2\pi c}{\lambda^{4}} \frac{hc}{\lambda \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1\right)}$$

или в компактной форме:

$$r_{\lambda T}^{*} = \frac{2\pi hc^{2}}{\lambda^{5}} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}.$$
 (5.25)

Формула Планка (5.25) удовлетворяет термодинамическому закону Вина, хорошо согласуется с результатами экспериментов и, естественно, из нее вытекают все исследовательские законы теплового излучения.

Исходя из связи между энергетической светимостью тела и его спектральной плотностью энергетической светимости (5.4), имеем для абсолютно черного тела:

$$R_e^* = \int_0^\infty \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} d\lambda; \ x = \frac{hc}{\lambda kT}; \ dx = -\frac{hcd\lambda}{\lambda^2 kT}.$$

После замены переменных имеем:

$$R_e^* = \frac{2\pi k^4}{h^3 c^2} T^4 \int_{-\infty}^0 \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} T^4 = \sigma T^4,$$
(5.26)

где  $\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \text{K}^4}$  – полностью совпадает со значением постоянной в законе Стефана – Больцмана. Таким образом, закон Стефана – Больцмана следует из формулы Планка.

Для проверки возможности получения закона смещения Вина (5.14) необходимо найти производную от выражения (5.26) и приравнять ее нулю:

$$\left(r_{\lambda T}^{*}\right)_{\lambda}'=0; \quad \left(\frac{2\pi hc^{2}}{\lambda^{5}}\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}\right)_{\lambda}=0 \Longrightarrow \lambda_{m}=\frac{b}{T}.$$
 (5.27)

,

Гипотеза Планка о дискретности энергии гармонического осциллятора совершила революционный переворот в физике, послужила основой создания квантовой оптики и в дальнейшем – современной квантовой механики.

#### 5.4. Понятие об оптической пирометрии

Особенности теплового излучения находят использование в практике *оптической пирометрии*, т. е. в принципах строения *оптических пирометров* – приборов для измерения температуры тел на основе изучения их теплового излучения. Их преимущество заключается в том, что для измерения температуры нет необходимости в непосредственном контакте с исследуемым телом. Можно мерить температуру стали в плавильной печи или температуру Солнца и других звезд, определять температуру спирали электрической лампы.

В зависимости от использованного свойства теплового излучения оптические пирометры делятся на *радиационные, цветовые и яркие*.

Принцип действия радиационных пирометров базируется на использовании закона Стефана – Больцмана (5.13). Измеряется общая мощность излучения тела и рассчитывается его энергетическая светимость. Радиационный пирометр градуируется по температуре абсолютно черного тела. Но излучение реального тела не подчиняется закону Стефана – Больцмана. Считая его серым, имеем

$$R_e = k \sigma T^4 = \sigma T_p^4$$
, откуда  $T = \frac{T_p}{\sqrt[4]{k}}$ ,

где *T* и *T*<sub>p</sub> – истинная и измеренная радиационным пирометром температура соответственно;

*k* – коэффициент поглощения тела.

Принцип действия цветовых пирометров базируется на использовании закона смещения Вина (5.14), смысл которого заключается в том, что с увеличением температуры меняется цвет свечения нагретого тела. Тело, начиная светиться, имеет красный цвет, который постепенно переходит в желтый, затем тело дает белый свет, как от Солнца, и т. д. Имея оптические фильтры определенных длин волн, можно найти длину волны, соответствующую максимуму излучения, и по закону Вина рассчитать температуру, которую бы имело черное тело с этой длиной волны, соответствующей максимуму свечения – цветовую температуру. Для расчета температур реальных тел используются эмпирически определенные для каждого вещества поправки.

Практически наиболее используемым является яркий оптический пирометр. Это прибор для бесконтактного определения температуры раскаленных тел, действие которого основано на сопоставлении яркостей эталонного и измеряемого тел. Температура эталонного тела градуирована по излучению абсолютно черного тела. Считается, что при равных яркостях температура этих тел одинакова. Но, учитывая закон Кирхгофа (5.10), мы видим, что это не так. Реальные тела при данной температуре и поглощают и излучают меньше, чем абсолютно черные. Температура  $T_{\rm sp}$ , полученная с помощью яркостного пирометра, называется *яркостной*, и она ниже истинной температуры реального тела. Яркие пирометры используются на практике для определения температуры раскаленных тел, например, для определения температуры печей, излучение из малых отверстий которых близко к излучению черного тела, для определения температуры поковок, температуры разливочной стали и т. д. Для разных тел у мастера есть таблица исправительных коэффициентов. Для вольфрама в пределах температур от 1000 до 2000 К этот коэффициент примерно постоянен и равен 1,26, т. е. истинная температура тела  $T = kT_{\rm sp}$ , где k = 1,26 для вольфрама.

Схематическое изображение красочного пирометра дано на рис. 5.5



Рис. 5.5

Таким образом, основной частью пирометра является эталонная лампа (Л) с профилированной нитью накала, которая питается от источника постоянного напряжения (Дж) – от аккумулятора или от сети через выпрямитель. Сила тока питания изменяется с помощью реостата (Р) и измеряется амперметром (А), шкала которого проградуирована по спектру абсолютно черного тела в градусах Цельсия. Реостат и амперметр вмонтированы в прибор. Получение четкого изображения спирали эталонной лампы и поверхности исследуемого тела происходит с помощью зрительной трубы, состоящей из объектива (Об) и оку-

ляра (Ок), которые свободно перемещаются. В зрительной трубе есть два фильтра: красный (КФ) для сопоставления яркостей узкого диапазона длин волн и дымчатый (ДФ), который изменяет соотношение яркостей и позволяет, не пережаривая эталонной лампы, измерять более высокие температуры тел. Амперметр имеет две шкалы: верхнюю, которая используется в измерениях без дымчатого фильтра (см. рис. 5.5), и нижнюю, которой пользуются, если этот фильтр введен.

Кроме пирометра ОП-4, возможно использование пирометра такого же принципа действия, но более современного, типа ЭОП-66, или других, еще более современных, в которых регистрация свечения или даже сопоставление свечения исследуемого тела со свечением черного тела происходит с помощью объективных методов регистрирования.

#### Тема 6. КВАНТОВАЯ ОПТИКА

- 6.1. Общие сведения по квантовой оптике.
- 6.2. Явления фотоэлектрического эффекта. Законы фотоэффекта.
- 6.3. Эффект Комптона и его теория.

#### 6.1. Общие сведения по квантовой оптике

*Квантовая оптика* изучает явления, обусловленные взаимодействием электромагнитного излучения с веществом, в которых проявляется квантовая природа света, т. е. свет ведет себя, как *поток частиц*, *корпускул, квантов*. Принципиальное отличие частиц от волнового процесса состоит в том, что частица локализована в пространстве и может передавать свои свойства практически мгновенно, а в волновом процессе энергия размыта в пространстве и во времени.

Развитие квантовой теории электромагнитного излучения началось с работы М. Планка, который ввел гипотезу квантования энергии. Для объяснения закономерностей в спектре теплового излучения Планк выдвинул предположение, что энергия гармонического линейного осциллятора может принимать значения, целочисленно кратные некоторой порции энергии hv, m. e. энергия осциллятора W = Nhv, где N – целое число; v – частота, на которую настроен осциллятор; h – постоянная Планка. А. Эйнштейн рассматривал тепловое излучение в состоянии равновесия с позиций теории флуктуаций, т. е. отклонений от равновесного состояния. Его теория, которая была разработана для идеальных газов, приводит к результату, что газ, занимающий объ-

ем V, может собраться в его малой доле  $\Delta V << V$  с вероятностью  $\Delta p = \left(\frac{\Delta V}{V}\right)^N$ , где N – общее количество молекул газа. Применив свой метод к равновесному тепловому излучению в адиабатически замкнутой зеркальной полости и воспользовавшись гипотезой Планка, Эйнштейн получил результат, что электромагнитное излучение с общей энергией W может собраться в малой доле общего объема с веро-

ятностью 
$$\Delta p = \left(\frac{\Delta V}{V}\right)^{\frac{W}{h_V}}$$
, где  $h_V$  – квант энергии по формуле План-

ка. Сопоставив формулы для флуктуаций газа и электромагнитного излучения, Эйнштейн приходит к выводу, что электромагнитное излучение ведет себя подобно газу. Он формулирует основы квантовой теории. Электромагнитное излучение и свет, как частный случай, ведут себя как некий газ, как совокупность частиц излучения. Свет излучается, распространяется и поглощается веществом в виде отдельных частиц (корпускул), квантов света, он назвал их фотонами. Фотоны обладают всеми свойствами корпускулы: они локализованы в

пространстве, имеют энергию  $\varepsilon = hv$ , массу  $m = \frac{hv}{c^2}$ , импульс

$$p = mc = \frac{hv}{c} = \frac{h}{\lambda}, \ \vec{p} = \hbar \vec{k}, \$$
где  $v$  – частота;  $\lambda$  – длина волны электромаг-

нитного излучения;  $h = 2\pi\hbar$  – постоянная Планка;  $\vec{k}$  – волновой вектор. Фотоны существуют только в движении со скоростью света в вакууме  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с, их масса покоя равна нулю. Попытка остановить фотон приводит к его гибели с передачей его энергии, массы, импульса препятствию. Энергетическая характеристика света – интенсивность светового потока – определяется как I = Nhv, где N – количество фотонов, попадающих на единицу поверхности или в единицу объема.

#### 6.2. Явления фотоэлектрического эффекта. Законы фотоэффекта

**Фотоэлектрическим эффектом**, или коротко **фотоэффектом**, называется одно из фотоэлектрических явлений, т. е. явлений, обусловленных взаимодействием света с электронами, которое заключается в освобождении фотоэлектронов с последующим их выходом за пределы вещества (*внешний фотоэффект*) или в получении возможности перемещаться в пределах вещества под действием электрического поля (внутренний фотоэффект). Внешний фотоэффект характерен для металлов, а внутренний – для полупроводников, где фотоэлектроны приводят к увеличению электропроводности полупроводника. Внутренний фотоэффект является основой работы фоторезисторов, приборов для преобразования светового сигнала в электрический. Если фотоэффект происходит на *p*-*n* переходе, переходе между полупроводниками *p*- и *n*-типов, так называемом вентильном переходе с односторонней проводимостью, то возникает фотоЭДС. Фотоэлектроны перемещаются в определенном направлении, создавая разность потенциалов – фотоЭДС. Это явление называется вентильным фотоэффектом, который используется для преобразования энергии света, например Солнца, в энергию электрическую. Такое преобразование происходит в солнечных батареях, которые устанавливаются на спутниках Земли или на домах для питания бытовых приборов.

Характерные свойства явления фотоэффекта наиболее непосредственно проявляют себя во внешнем фотоэффекте, где фотоэлектроны могут с поверхности металла попадать в вакуум для последующего изучения их особенностей. Схематическое изображение экспериментальной установки для исследования явления фотоэффекта представлено на рис. 6.1, *а*.

В стеклянном баллоне, где поддерживается вакуум порядка  $10^{-6}$  мм рт. ст., вмонтированы катод (К) и анод (А). Свет попадает на фотокатод, проходящий через светофильтр (СФ), что дает возможность выделить определенную частоту v и длину волны  $\lambda$  света. Разность потенциалов между анодом и катодом создается за счет источника энергии.



Рис. 6.1

Потенциал анода по отношению к катоду регулируется потенциометром. При этом есть возможность подавать на анод запорный потенциал. Сила фототока I и разность потенциалов U между анодом и катодом регистрируются соответственно амперметром A и вольтметром V (см. рис. 6.1, a).

Зависимость фототока от разности потенциалов – вольт-амперная характеристика устройства – представлена графиком на рис. 6.1, б. Важными особенностями вольт-амперной характеристики является наличие, во-первых, тока насыщения  $I_{\rm H}$  (см. рис 6.1, б), т. е. тока, при достижении которого увеличение разности потенциалов не приводит к его росту; во-вторых, наличие нулевого тока  $I_0$ , т. е. тока, не равного нулю при нулевой разности потенциалов между анодом и катодом. Для того чтобы ток сравнялся с нулем, необходимо использовать задерживающее электрическое поле с разностью потенциалов  $U_3$  – запирающая разность потенциалов  $U_3$ , которая носит название запирающий потенциал (запирающее напряжение).

Наличие тока насыщения является результатом того, что количество выбитых фотонов с поверхности катода в единицу времени при данном излучении и данном катоде есть определенная величина. Это значит, что по величине тока насыщения можно сделать вывод о количестве выбитых в единицу времени фотоэлектронов. При данном светофильтре, при данной длине света, как показывают исследования, зависимость силы тока насыщения от освещенности фотокатода прямо пропорциональна (рис. 6.2, *a*).



Рис. 6.2

Наличие нулевого тока предполагает, что фотоэлектроны имеют начальную скорость выхода из катода и начальную кинетическую

энергию. Для того чтобы ее отобрать от фотоэлектронов, необходима работа сил обратного электрического поля. Причем

$$A_3 = eU_3 = T_{\max} = \frac{mV_{\max}^2}{2},$$
 (6.1)

где  $T_{\text{max}} = \frac{mV_{\text{max}}^2}{2}$  – максимальное значение кинетической энергии фо-

тоэлектронов;

е – заряд электронов;

U<sub>3</sub> – задерживающий потенциал.

Замена светофильтра (частоты излучения) приводит к изменению потенциала запирания, а зависимость потенциала запирания от частоты электромагнитного излучения, как показывают опыты, имеет линейную зависимость (см. рис. 6.2,  $\delta$ ). Кроме того, существует частота  $v_0$ , ниже которой, при данной длине волны и данном материале фотокатода, фотоэффект не происходит.

Исследовательские данные дают возможность сформулировать следующие *законы фотоэффекта*.

1. Максимальная энергия и максимальная скорость фотоэлектронов из определенного материала для света данной частоты зависит только от освещенности поверхности тела.

2. Существует такая предельная частота  $v_0$ , ниже которой фотоэффект не наблюдается. Она называется *красной границей* фотоэффекта. Красная граница зависит от химической природы вещества и от состояния его поверхности.

3. Число фотоэлектронов, выходящих за пределы поверхности данного вещества, для света данной частоты зависит только от освещенности поверхности и прямо пропорционально ей.

4. Число фотоэлектронов с увеличением частоты света, при равных других условиях, увеличивается.

Кроме названных законов, для фотоэффекта *характерным является безинерционность* – фотоэлектроны появляются не позднее чем через 10<sup>-9</sup> с после начала осветления поверхности металла.

Классическая волновая теория света не может объяснить такие закономерности явления фотоэффекта. Объяснение законов фотоэффекта и самого явления возможно в рамках квантовой теории света (см. п. 1).

Поток N фотонов света с энергиями hv, при заданной интенсивности I, создает освещенность поверхности тела E за счет фотонов, попадающих на каждую единицу площади поверхности тела. Металл для электронов является потенциальной ямой, для извлечения из которой требуется работа выхода  $A_{вых}$ . Есть определенная вероятность p того, что один из этих фотонов передаст свою энергию одному электрону вещества; вероятность того, что два фотона передадут энергию одному электрону или что один фотон передаст энергию двум электронам, мала. Величина p зависит как от природы вещества тела, так и от энергии фотона. Каждый из электронов, получив энергию hv, потратит ее частично на выполнение работы выхода  $A_{вых}$ , остальная энергия электрона останется в виде его кинетической энергии. Возможны и другие затраты энергии, поэтому в лучшем случае, когда названные затраты являются едиными, по закону сохранения и преобразования энергии имеем соотношение, которое известно под именем **уравнения Эйнишейна**:

$$hv = A_{\rm BMX} + T_{\rm max} = A_{\rm BMX} + \frac{mV_{\rm max}^2}{2}.$$
 (6.2)

Такие представления дают полное объяснение законов и закономерностей явления фотоэффекта. Действительно, акт взаимодействия фотона с электроном практически мгновенен, что объясняет безинерционность явления. Как видно из уравнения (6.2), энергия и скорость фотоэлектронов для данного материала зависят только от частоты. Наличие красной границы также понятно: фотоэффект возможен только при условии, что  $hv \ge A_{вых}$ . Очевидно, что предельная пороговая частота  $v_0$ , при которой фотоэффект еще наблюдается, определяется из условия равенства

$$v_0 = \frac{A_{\text{Bbix}}}{h} \tag{6.3}$$

и зависит от тех условий, что и работа выхода электронов из металла, т. е. от природы вещества и состояния поверхности тела. Третий закон также понятен. С увеличением освещенности поверхности тела увеличивается количество фотонов N, что при данной вероятности p процесса передачи энергии фотона электрону приведет к увеличению числа фотоэлектронов pN. Четвертый закон объясняется увеличением вероятности p передачи энергии фотоном электрону с увеличением частоты, а также с учетом количества и энергии фотона.

Уравнение Эйнштейна (6.2) может быть переписанным в различных формах с учетом равенств (6.1) и (6.3), а также того, что  $v = \frac{c}{\lambda}$ , где  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с – скорость света в вакууме;  $\lambda$  – длина волны света:

$$hv = A_{\text{Bbix}} + T_{\text{max}} = A_{\text{Bbix}} + \frac{mV_{\text{max}}^2}{2};$$
  
$$h\frac{c}{\lambda} = hv = A_{\text{Bbix}} + eU_3 = h\frac{c}{\lambda_0} + eU_3.$$
 (6.4)

#### 6.3. Эффект Комптона и его теория

Другое фотоэлектронное явление, которое находит объяснение с позиций квантовой механики и подтверждает наличие импульса фотона, есть явление увеличения длины волны рентгеновских лучей в следствие их рассеяния электронами вещества, открытое американским физиком А. Комптоном в 1922 г., получившее название эффект Комптона.

Так называемый *простой эффект Комптона* заключается в увеличении длины волны в рассеянных легкими парафинами и графитами рентгеновских лучах и подчиняется опытному закону:

$$\Delta \lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_k \left( 1 - \cos \varphi \right), \tag{6.5}$$

где  $\lambda_1$  – длина падающих лучей;

λ<sub>2</sub> – длина рассеянных под углом φ рентгеновских лучей;

 $\lambda = 2,42 \cdot 10^{-12}$  м – постоянная величина, так называемая комптоновская длина волны.

Схематическое изображение экспериментальной установки приведено на рис. 6.3.



Рис. 6.3

Электромагнитное излучение от рентгеновской трубки, проходя через систему диафрагм (Д) и фильтр (Ф) узким пучком излучения определенной длины волны  $\lambda_1$ , попадает на рассеивающее вещество *PP* (например графит). Исследуется рассеянное под углами  $\phi$ , где измеряется длина волны  $\lambda_2$ .

Обращает на себя внимание тот факт, что происходит только увеличение длины волны (уменьшение частоты), которое не зависит от природы рассеивающего вещества, а определяется только углом рассеивания (см. формулу (6.5)). Классическая теория объясняет рассеяние излучения веществом как вторичное излучение заряженных частиц вещества, выполняющих вынужденные колебания под действием падающего излучения. Но, по положению классической теории, вынужденные колебания происходят с частотой принуждающей силы. Излучение заряженных частиц в результате их колебаний происходит также с той же частотой. Таким образом, новая частота появиться не должна. В классической теории эффект связан с изменением частоты волновых процессов при относительных движениях источника и приемника колебаний – это так называемый эффект Допплера. Но в эффекте Допплера возможен как рост, так и уменьшение частоты. Кроме того, это совершенно другой порядок изменений частот и совершенно другой закон. Следовательно, классическая теория не может объяснить эффект Комптона и обосновать его закон.

Эффект Комптона вполне естественно и довольно просто объясняется квантовой теорией электромагнитного излучения. Поскольку кванты электромагнитного излучения в десятки тысяч раз более энергичны, чем кванты видимого света, и имеют энергию в десятки тысяч раз больше энергии связи электронов в парафинах и графитах, можно считать, что электрон является свободной частицей. Систему рентгеновский фотон – электрон, таким образом, можно считать замкнутой и консервативной. Поэтому для нее имеют место законы сохранения импульса (рис. 6.4) и энергии:

$$\vec{p}_{1} = \vec{p}_{2} + \vec{p}_{e}; \quad \hbar \vec{k}_{1} = \hbar \vec{k}_{2} + m \vec{V}; \hbar \omega_{1} + m_{0}c^{2} = \hbar \omega_{2} + mc^{2},$$
(6.6)

где  $\vec{p}_i = \hbar \vec{k}_i$ ;  $p_i = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_i} = \frac{h}{\lambda_i}$  – импульсы падающего и рассеянного фото-

нов (*i* = 1, 2) и их модули;

 $m\vec{V}$  – импульс электрона отдачи (см. рис. 6.4);

$$\hbar\omega_1 = \frac{hc}{\lambda_1}$$
 – энергия падающего фотона;

$$\hbar \omega_2 = \frac{hc}{\lambda_2}$$
 – энергия рассеянного фотона;

 $m_0 c^2$  – энергия покоя электрона;

*mc*<sup>2</sup> – энергия электрона отдачи – электрон после столкновения с энергичным фотоном становится релятивистской частицей.



Рис. 6.4

Для решения системы уравнений (6.5) необходимо векторные равенства заменить скалярными, например, воспользовавшись теоремой косинусов:

$$(mV)^{2} = \left(\frac{h}{\lambda_{1}}\right)^{2} + \left(\frac{h}{\lambda_{2}}\right)^{2} - 2\frac{h^{2}}{\lambda_{1}\lambda_{2}}\cos\varphi.$$
(6.7)

Соответственно перепишем закон сохранения энергии

$$mc^2 = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2} + m_0 c^2$$

и, после сокращения на с, возведем обе части в квадрат:

$$(mc)^{2} = \left(\frac{h}{\lambda_{1}}\right)^{2} + \left(\frac{h}{\lambda_{2}}\right)^{2} + (m_{0}c)^{2} - \frac{2h^{2}}{\lambda_{1}\lambda_{2}} + \frac{2h^{2}m_{0}c}{\lambda_{1}} - \frac{2h^{2}m_{0}c}{\lambda_{2}}.$$
 (6.8)

Вычтем от равенства (6.8) соотношение для импульсов и получим:

$$(mc)^{2} - (mV)^{2} = (m_{0}c)^{2} - \frac{2h^{2}}{\lambda_{1}\lambda_{2}}(1 - \cos\varphi) + 2h^{2}m_{0}c\left(\frac{1}{\lambda_{1}} - \frac{1}{\lambda_{2}}\right).$$
(6.9)

Воспользуемся выражением для релятивистского выражения для массы:  $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}}$ , из которого после преобразования следует,

что  $(mc)^2 - (mV)^2 = (m_0c)^2$ , и таким образом имеем из равенства (6.7) такой результат:

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \varphi), \qquad (6.10)$$

в котором  $\frac{h}{m_0 c} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8} = 2,43 \cdot 10^{-12} (M) = \lambda_k.$ 

Следовательно, квантовая теория не только объясняет причины эффекта Комптона и дает его количественное описание, но также раскрывает физическое содержание комптоновской длины волны, выражая ее через другие мировые константы.

# **II. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА**

# Тема 7. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

7.1. Гипотеза де Бройля и ее опытное обоснование.

7.2. Волны де Бройля. Пси-функция и ее физический смысл.

7.3. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.

7.4. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера и стандартные требования к у-функции.

#### 7.1. Гипотеза де Бройля и ее опытное обоснование

Установление двойственной природы электромагнитного излучения привело французского ученого Луи де Бройля в 1914 г. к предположению, что и электрон – объект, считающийся частицей материи, также имеет двойственную природу. Если электромагнитному излучению сопоставляется поток частиц (фотонов), то, напротив, потоку частиц – электронов можно сопоставить некий волновой процесс. Причем связь между волновыми и корпускулярными свойствами остается той же. Это значит, что электрону с импульсом  $\vec{p} = m\vec{V}$  соответствует волновой процесс с длиной волны

$$\lambda = \frac{h}{p}.\tag{7.1}$$

Но выдвинутое предположение, чтобы стать теоретическим положением, требует экспериментального подтверждения. Идея такого эксперимента была выдвинута А. Эйнштейном. Поток электронов заданной энергии и импульса создается в электронной пушке, где под действием электрического поля с разностью потенциалов U, за счет работы сил электрического поля A = eU увеличивается кинетическая энергия электронов  $eU = \frac{p^2}{2m}$ . Значит, электроны приобретают импульс  $p = \sqrt{2meU}$  и, согласно гипотезе де Бройля, им соответствует волновой процесс с длиной волны  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me}} \cdot \frac{1}{\sqrt{U}} = \frac{1,225 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{U}}$  (м). Если разность потенциалов порядка сотен вольт, то соответствующая длина волны порядка 10<sup>-10</sup> м, т. е. это соответствует рентгеновскому

диапазону электромагнитного излучения. Если волновые свойства действительно присутствуют, то должна наблюдаться дифракция электронов на пространственной решетке, которая подчиняется максимумам по закону Вульфа – Брэгга:

$$2d\sin\varphi = k\lambda = k\frac{1,225\cdot10^{-10}}{\sqrt{U}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$
(7.2)

где *d* – постоянная выбранного кристалла, угол, создающий поток электронов с поверхностью кристалла.



Рис. 7.1

Опыт был выполнен К. Дэвиссоном и Л. Джермером в 1927 г. Схематическое изображение экспериментальной установки представлено на рис. 7.1. Поток электронов формируется электронной пушкой и попадает на кристалл никеля под углом скольжения ф. После взаимодействия с кристаллом электроны попадают в цилиндр Фарадея и, идя через проводник к заземлению, в гальванометре G создают электрический ток. Согласно формуле (7.2), можно ожидать периодичность в зависимости силы тока от разности потенциалов (а точнее от  $\sqrt{U}$ ). Если гипотеза де Бройля не подтверждается, то график зависимости силы тока от напряжения должен иметь форму плавной кривой. Результаты исследований представлены на рис. 7.2, где очень отчетливо видна периодическая зависимость силы тока от разности потенциалов в соответствии с формулой как Вульфа – Брэгга (7.2), так и формулы де Бройля, которая положена в основу проведенного опыта и формулы (7.2). Таким образом, проведенные опыты бесспорно подтвердили гипотезу де Бройля.


Рис. 7.2

Позднее опыты исследования волновых свойств электронов были проведены П. С. Тартаковским в Ленинградском университете и, независимо от него, Г. Томсоном. Опыты заключались в исследовании прохождения электронных пучков через тонкие пленки поликристаллических структур. По своей постановке опыты были аналогичны опытам из дифракции рентгеновских лучей. Результаты представлены на рис. 7.3 для рентгеновских лучей на пластинке алюминия (слева) и пучка электронов, прошедших сквозь пленки золота и меди. Пользуясь подобными фотографиями, Г. Томсон, применяя формулу де Бройля (7.1), произвел расчеты периода кристаллической решетки исследованных металлов. Результаты полностью совпали с результатами рентгеноструктурного анализа.



Рис. 7.3

Таким образом, гипотеза де Бройля была подтверждена экспериментально и стала теоретическим положением. Но возникает вопрос: волновые свойства электронов – это коллективное свойство пучка или каждая частица обладает такими волновыми свойствами. В 1949 г. советские ученые Л. М. Биберман, Н. С. Сушкин и В. А. Фабрикант провели опыт по исследованию волновых свойств электронов, аналогичный опыту Тартаковского – Томсона, но с тем отличием, что электроны поочередно проходили через пластинку, время прохождения через пластинку было значительно меньше времени следования один за другим. Когда время экспозиции картины было достаточно большим, полученная дифракционная картина ничем не отличалась от представленной на рис. 7.3. Важно отметить, что каждый электрон попадал в какую-то точку экрана, как отдельная частица, но он попадал в те части экрана, которые подчинялись волновому закону дифракции для соответствующего волнового процесса.

Таким образом, гипотеза де Бройля о дуалистическом характере электронов подтверждена, более того, доказано, что дуалистические, корпускулярно-волновые свойства принадлежат каждой отдельной частице. На современном этапе развития науки такие свойства микрообъектов не вызывают сомнений, вместо рентгенографии в исследовании структуры кристаллов используется электронография, протоно- и нейтронография. Волновые характеристики электронов употребляются в электронных микроскопах.

Волновые свойства проявляются на уровне элементарных частиц и для атомов и даже для молекул. Но макроскопические частицы, например пылинка размером  $10^{-6}$  м и массой  $10^{-6}$  г, движущаяся со скоростью 1 мм/с, не может проявить свои волновые свойства потому,

что соответствующая ей длина волны  $\lambda = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{10^{-9} \cdot 10^{-3}} \approx 7 \cdot 10^{-22}$  (м). Ди-

фракционная решетка, для того чтобы она была дифракционной решеткой для такой пылинки, должна иметь период порядка  $10^{-20}$  м, что несравненно меньше размеров частицы – она не пройдет через такую решетку. Поэтому корпускулярно-волновой дуализм присущ только объектам микромира. А исследование движения микрообъектов требует создания новой механики, основанной на волновых представлениях о природе частиц. Такая теория создана, она называется квантовая механика.

### 7.2. Волны де Бройля. Пси-функция и ее физический смысл

В квантовой механике микрообъекта с импульсом  $\vec{p} = m\vec{v}$  и энергией E = hv сопоставляется некоторый волновой процесс  $\psi$ ,  $\psi$ - $\phi$ ункция с частотой  $v = \frac{E}{h}$ ,  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  и длиной волны  $\lambda = \frac{h}{p}$  и волно-

вым вектором  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ . В случае свободного электрона плоскую гармоническую волну

$$\Psi = A_0 e^{-i\left(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} + \alpha\right)} = A_0 e^{-\frac{i}{\hbar}\left(Et - \vec{p} \cdot \vec{r} + \alpha\right)},$$
(7.3)

что соответствует свободному электрону с этим импульсом  $\vec{p}$  и энергией E и соответствующими им длиной волны  $\lambda$ , волновым вектором  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  и частотой  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ , называют волной де Бройля, или просто  $\psi$ -фукцией.

Дифракционная картина перераспределения интенсивности освещения экрана от прошедших электронов, например, через щель или другое отверстие диафрагмы, с точки зрения волнового процесса пропорциональна  $I \approx \psi^2$ . А ведь интенсивность освещения экрана под действием попавших на него электронов пропорциональна их числу:

 $I \approx \frac{\Delta N}{N\Delta V}$ , где  $\Delta V$  – элемент объема, в который они попали;  $\frac{\Delta N}{N\Delta V} = \frac{\Delta p}{\Delta V} = \rho(x, y, z, t)$ , определяет плотность вероятности находиться в заданной точке с координатами *x*, *y*, *z* в данный момент времени *t* для электрона или другого микрообъекта. Таким образом, **фи зический смысл** волн де Бройля состоит в том, что квадрат их модуля (в общем случае волна де Бройля выражается комплексной функцией),

$$|\psi|^2 = \psi \psi^* = \rho(x, y, z, t)$$
, (7.4)

определяет плотность вероятности микрообъекта находиться в данной точке пространства для заданного момента времени. Реальный процесс, изображающий волны де Бройля, на данном этапе развития науки не известен, поэтому эти волны считаем как волны вероятности.

## 7.3. Соотношение неопределенностей Гейзенберга

Двойственная природа квантовых объектов приводит к тому, что для их определения мы не можем воспользоваться ни характеристиками материальных точек (координата, импульс, энергия), ни характеристиками гармонических волн (частота, длина волны). На использование тех и других характеристик налагаются некоторые ограничения. Динамические характеристики материальной точки используются с ограничениями, известными как соотношение неопределенностей Гейзенберга. Две канонически сопряженные динамические характеристики (т. е. входящие одновременно в канонические уравнения механики Гамильтона) не могут быть известны совершенно точно одновременно, их неопределенности связаны следующими соотношениями:

$$\Delta x \Delta p_x \ge \hbar; \ \Delta y \Delta p_y \ge \hbar; \ \Delta z \Delta p_z \ge \hbar; \ \Delta E \Delta t \ge \hbar, \tag{7.5}$$

где рассмотрены неопределенность координат и неопределенность проекций импульсов на соответствующие оси, а также неопределенность значения энергии частицы и время ее существования в состоянии с данной  $\psi$ -функцией.

Гармоничной волной также невозможно в общем случае изображать квантовую составляющую, потому что фазовая скорость волны отличается от скорости движения частицы:

$$V_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mV^2}{2mV} = \frac{V}{2} \neq V.$$

Ее можно изображать некоторой группой волн с частотным набором  $\omega \pm \frac{\Delta \omega}{2}$ , если  $\Delta \omega \Delta t \ge 2\pi$ , где  $\Delta t$  – время существования микрообъекта в данном состоянии. Действительно

$$V_{\rm rp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\hbar\omega}{d\hbar k} = \frac{dE}{dp} = \frac{d\left(\frac{p^2}{2m}\right)}{dp} = \frac{2p}{2m} = V$$

Но использование в квантовой механике аппарата для изучения поведения групп волн имеет трудности, связанные с сильной дисперсией волн де Бройля: волновой пакет быстро расплывается, а частица может существовать в данном состоянии достаточно долго. Поэтому наука, изучающая поведение объектов микромира, нуждается в особой теории и эта теория – квантовая механика.

Сами соотношения неопределенностей (7.5) имеют самостоятельное значение, они разрешают проводить оценку значений тех либо других характеристик квантовых объектов. Но для их определения, для изучения поведения объектов микромира необходимо иметь закон движения.

### 7.4. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера и стандартные требования к у-функции

Так как движение микрообъектов сродни волновому движению, основной закон квантовой механики должен быть подобным волновому уравнению, а не уравнению Ньютона, например, для материальной точки, которое включало бы в себя динамические характеристики микрообъектов. Такой закон открыл Э. Шрёдингер. Он учитывает особенности движения микрообъектов, является фундаментальным законом, выводы из которого не противоречат опыту. Этот закон называется уравнением Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \left[E - U\left(x, \, y, \, z, \, t\right)\right]\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\,,\tag{7.6}$$

это так называемое временное, или общее уравнение Шрёдингера, в котором  $\Delta$  – оператор Лапласа, представляющий собой совокупность вторых производных по координатам; E – энергия микрочастицы, а U(x, y, z, t) – ее потенциальная функция, определяющая особенности силового поля, в котором движется микрообъект, т. е. конкретизирует задачу.

Решив уравнение Шрёдингера, получим конкретную  $\psi$ -функцию, квадрат модуля которой  $|\psi|^2 = \rho(x, y, z, t)$ , что даст возможность изучить движение исследуемого тела.

Благодаря тому, что  $\psi$ -функция входит в уравнение Шрёдингера, а квадрат ее модуля имеет содержание плотности вероятности, величины, подвергающейся непосредственным физическим измерениям, на нее накладывается ряд ограничений. Эти ограничения носят название стандартных условий:  $\psi$ -функция *должна быть гладкой, т. е. дифференцированной вместе со своей производной по пространственной координате и по времени; однозначной; непрерывной, конечной и нормированной на единицу.* Выполнение этих условий накладывает ограничения на возможные значения параметра *Е.* Для того чтобы  $\psi$ -функция соответствовала стандартным условиям, энергия может принимать только такие значения, что создают спектр ее разрешенных значений. Имеется большой круг задач, в которых исследуется стационарное движение, т. е. не изменяющееся со временем движение. Признаком такого движения является независимость потенциальной функции от времени, которая в таком случае является потенциальной энергией исследуемого микрообъекта. В стационарном движении  $\psi$  -функция может быть представлена как  $\psi = \psi e^{-i\omega t}$ , где  $\psi$  – амплитуда вероятности. Подстановка такого выражения к уравнению Шрёдингера позволяет его значительно упростить:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \tag{7.7}$$

Уравнение (7.7) является стационарным уравнением Шрёдингера, пригодным для решения только стационарных задач. Стандартные требования к  $\psi$ -функции стационарного движения такие же, как и к  $\psi$ -функции общего случая. Условие нормирования вероятностной  $\psi$ -функции имеет вид:  $\int_{V} |\psi|^2 dV = 1$  или, потому что  $\psi$ -функция, как

правило, комплексна

$$\int_{V} \psi \psi^* dV = 1 \tag{7.8}$$

и означает, что возможность найти частицу в области существования есть подлинное событие.

# Тема 8. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

 Частица в прямоугольном одномерном ящике с бесконечно высокими стенками.

8.2. Квантовый гармонический осциллятор.

8.3. Поведение микрообъектов на прямоугольном одномерном барьере. Тоннельный эффект.

Исследование элементарных задач квантовой механики преследует цель знакомства с методами квантовой механики, но, кроме того, они могут играть самостоятельную роль. Потому что особенности поведения квантовых объектов определяются особенностями силовых факторов, входящих в стационарное уравнение Шредингера через потенциальную энергию, задачи, по договоренности, формулируются по форме графика потенциальной энергии изучаемого объекта: поведение частицы в потенциальном ящике или в потенциальной яме; в параболической яме; в гиперболической яме; поведение частиц на прямоугольном потенциальном барьере и т. д.

#### 8.1. Частица в прямоугольном одномерном ящике с бесконечно высокими стенками

Рассматривается поведение квантовой частицы в одномерном движении в потенциальном поле, зависимость потенциальной энергии которого представлена на рис. 8.1, a, с графиком, имеющим форму прямоугольного ящика (ямы) шириной l с бесконечно высокими стенками (рис. 8.1,  $\delta$ ).



Рис. 8.1

Так как движение одномерное, а потенциальное поле не зависит от времени, поведение квантовой частицы описывается функцией  $\psi(x)$ , которая подчиняется одномерному стационарному уравнению Шрёдингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}E\psi = 0.$$
 (8.1)

Это линейное дифференциальное уравнение хорошо известно как дифференциальное уравнение гармонических колебаний. В нем можно обозначить

$$\frac{2mE}{h^2} = k^2, \tag{8.2}$$

где *k* – действительное число, потому что все величины, определяющие его существенно положительные величины. Для решения дифференциального уравнения второго порядка необходимо добавить два предельных или начальных условия и, учитывая вероятностный характер  $\psi$ -функции, условие ее нормирования на единицу. Таким образом, с учетом замены (8.2) имеем:

$$\frac{d^{2}\Psi}{dx^{2}} + k^{2}\Psi = 0;$$

$$\Psi(0) = 0; \quad \Psi(l) = 0; \quad \int_{0}^{l} |\Psi(x)|^{2} dx = 1,$$
(8.3)

где предельные условия связаны с бесконечностью потенциальной энергии вне ящика и с непрерывностью ψ-функции и означают, что на границах ящика частица быть также не может.

Решениями уравнения (8.3) являются гармонические функции:

$$\psi(x) = \psi = A\sin(kx + \alpha), \qquad (8.4)$$

где *A*, α – постоянные интегрирования, находящиеся из граничных условий и нормирования:

$$\psi(0) = A \sin \alpha \to \alpha = 0;$$
  

$$\psi(l) = A \sin kl = 0 \to kl = n\pi; n = 1, 2, 3, ...; k = \frac{n\pi}{l}.$$
(8.5)

Нормирующий коэффициент А находится из условия:

$$\int_{0}^{l} A^{2} \sin^{2} \frac{n\pi}{l} x dx = 1 \Longrightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$
(8.6)

Таким образом, для  $\psi$ -функции имеет место выражение:

$$\Psi(x) = \Psi = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x, n = 1, 2, 3, \dots$$
(8.7)

Квантовое число *n* определяет номер состояния частицы и не может принимать нулевое значение потому, что это означало бы, что частица нигде не существует.

Решение уравнения Шрёдингера позволяет определить физическое содержание постоянной k (см. соотношение (8.2) и (8.5)) как волнового числа для волны де Бройля, которая сопоставляется частице в рассматриваемых условиях.

Квадрат ψ-функции определяет плотность вероятности нахождения частицы в разных точках ящика:  $\rho(x) = \frac{2}{l} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x$ ; n = 1, 2, 3, .... Графики ψ-функций для разных состояний и соответствующие графики распределения плотности вероятностей  $\rho(x)$  нахождения частицы в разных точках ящика приведены на рис. 8.2.



Рис. 8.2

Обращает на себя внимание тот факт, что в нечетных состояниях, когда n = 2m + 1, частица с максимальной вероятностью находится в точке, соответствующей координате x = l / 2. В случае четных значений n = 2, 4, ..., напротив, частица в этой точке не может находиться. Подобные состояния наблюдаются для стоящих волн колебаний струн.

Как было указано при представлении уравнения Шрёдингера, решение уравнения позволяет определиться с энергией частицы в потенциальном ящике. Для этого вернемся к соотношению (8.2) и (8.5):

$$\frac{2mE}{h^2} = k^2 = n^2 \frac{\pi^2}{l^2} \Longrightarrow E_n = n^2 \frac{\pi^2 h^2}{2ml^2}, n = 1, 2, 3, \dots$$
 (8.8)

Это значит, что энергия частицы потенциального ящика принимает дискретный ряд разрешенных значений – квантуется.

Расстояние между отдельными энергетическими уровнями (рис. 8.3)

$$\Delta E_{n+1,n} = E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{\pi^2 h^2}{2ml^2}$$
(8.9)

растет с увеличением номера состояния, т. е. с ростом энергии, но относительное расстояние

$$\frac{\Delta E_{n+1,n}}{E_n} = \frac{(2n+1)}{n^2},$$
(8.10)

напротив, уменьшается и, когда  $n \rightarrow \infty$ , т. е. когда энергия существенно возрастает, относительное расстояние между энергетическими уровнями стремится *к нулю. Соответственно, квантованием энергии при больших значениях энергий можно пренебрегать.* Пренебрегать квантованием энергии следует также для микрочастиц с большой массой и для потенциальных ящиков, ширина которых существенно превышает атомные размеры (~10<sup>-10</sup> м), как это легко подтвердить исходя из формул (8.8) и (8.9).



Рис. 8.3

### 8.2. Квантовый гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором называется система, или материальная точка, удерживаемая в положении равновесия упругими или квазиупругими силами. Осциллятор выполняет гармонические колебания по закону  $x = A\sin(\omega t + \alpha)$ , его потенциальная энергия  $U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$  имеет график зависимости от смещения в виде параболы (рис. 8.4) – поэтому изучается *поведение частицы в параболи*-

*ческой яме*. Сначала рассмотрим некоторые интересующие нас на данном этапе изучения особенности поведения классического осциллятора. Во-первых, его движение выполняется в пределах интервала [-A, +A]. Во-вторых, и это очень важно, есть вероятность найти осцил-

лятор в указанном интервале  $dP(x) = \frac{2dt}{T}$ , где T – период колебаний.



Рис. 8.4

Плотность вероятности иметь осциллятор в точке с координатой x  $\rho(x) = \frac{dP(x)}{dx} = \frac{2dt}{Tdx} = \frac{2}{T} \left(\frac{dx}{dt}\right)^{-1}$ . После подстановки соответствующих значений получим:

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi A \sqrt{1 - \frac{x^2}{A^2}}}.$$
(8.11)

Как это следует из соотношения (8.11) плотность вероятности найти осциллятор в исследуемом интервале изменяется от значения  $\rho(0) = \frac{1}{\pi A}$  до  $\rho(A) \to \infty$  (см. рис. 8.4). Наименее вероятно осциллятор находится в центре потенциальной ямы, где он двигается с максимальной скоростью. На краях потенциальной ямы, в крайних точках интер-

вала движения, где направление движения меняется на противоположное, осциллятор останавливается, что соответствует густоте вероятности найти его в этих точках стремится к бесконечности.

Для исследования особенностей поведения квантового осииллятора, особенностей поведения квантовой частицы в параболической потенциальной яме запишем закон его движения. Это стационарное одномерное движение, потому закон его движения (см. уравнение Шрёдингера (7.7)):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0.$$
 (8.12)

Для решения этого дифференциального уравнения, для поиска аналогичных дифференциальных уравнений, решения которых известны, переметим постоянные коэффициенты:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \beta; \quad \frac{m\omega}{\hbar} = \alpha. \tag{8.13}$$

Уравнение (8.12) примет вид:  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0$ , в котором про-

изведем замену переменных:  $\sqrt{\alpha x} = z \Rightarrow \frac{d^2 \psi}{dx^2} = \alpha \frac{d^2 \psi}{dz^2}$ , что приведет, после деления на α, к известному в математике уравнению:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - z^2\right)\psi = 0, \qquad (8.14)$$

которое путем подстановки  $\psi(z) = e^{-\frac{z^2}{2}}H(z)$  сводится к так называемому уравнению Чебышева – Эрмита. Для H(z) решения ищут в виде ряда, и оно должно иметь вид полинома, в противном случае  $\psi(x)$  не превращается в ноль в бесконечности. Требования обрыва ряда на некотором числе и стандартные требования к у-функции требуют, чтобы коэффициент  $\frac{\beta}{\alpha}$  принимал значения нечетных чисел натурального ряда:  $\frac{\beta}{\alpha} = \frac{2E}{\hbar \omega} = 2n + 1;$  n = 0, 1, 2, ..., что налагает ограничения на

возможные значения энергии осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right).$$
  $n = 0, 1, 2, 3, ...$  (8.15)

Собственные функции имеют вид:  $\psi_n(x) = e^{-\frac{x^2m\omega}{2\hbar}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{a}}\right)$ , где –

 $H_n\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha}}\right) = H_n(z)$  так называемые полиномы Чебышева – Эрмита:  $H_0(z=1); H_1(z) = 2z; H_2(z) = 4z^2 - 2$  и т. д.

Подходящая плотность вероятностей  $\rho(x) = \psi_n^2(x)$  для некоторых состояний осциллятора, определяемых собственными функциями, представлена на графиках рис. 8.5, где пунктирной линией выполнены распределение густоты вероятностей нахождения классического осциллятора в точках рассматриваемого интервала движения.



Рис. 8.5

Наибольшие отличия в поведении классического и квантового осцилляторов заключаются в том, что квантовый осциллятор с определенной вероятностью может находиться за пределами разрешенного интервала движений. Классический осциллятор принципиально не может выходить за пределы движения в интервале [-A, +A] (см. пунктирную линию на рис. 8.5). Кроме того, представлены существенные отличия в зависимости плотности вероятностей при малых значениях энергии системы, т. е. при малых значениях квантового числа *n* (см. рис. 8.5 для n = 0 и n = 1).

С увеличением энергии осциллятора (для n = 10 на рис. 8.5) графики становятся более сходными и по  $n \rightarrow \infty$ , очевидно, графики совпадают. Это значит, что поведение квантового осциллятора при высоких энергиях, когда значение кванта энергии стремится к нулю, по сравнению с общей энергией системы не отличается от поведения классического осциллятора.

Особый интерес представляет исследование энергии квантового гармонического осциллятора, вытекающего из анализа формулы (8.15). Во-первых, без лишних гипотез следует, что энергия осциллятора квантуется, принимая значения ровно удаленной квантом энергии  $\varepsilon = \hbar \omega$  (см. рис. 8.6).



Рис. 8.6

Чрезвычайно важен теоретический вывод о существовании нулевой энергии осциллятора:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \qquad (8.16)$$

имеющий экспериментальное подтверждение, еще раз указывающее на правильность основных положений квантовой механики.

Исследования указывают на то, что и при температуре  $T \rightarrow 0$  у атомов сохраняется некоторые «нулевые колебания», на которых происходит рассеяние света. Этим нулевым колебаниям и соответствует нулевая энергия осцилляторов.

Нулевые колебания являются характерным признаком случайной системы частиц, рассматриваемых квантовой механикой. Нулевая энергия позволяет понять, почему гелий является единственным веществом, которое может существовать в жидком состоянии при темпера-

туре  $T \rightarrow 0$ . Это связано, во-первых, с тем, что у гелия частота колебаний атомов  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  при малой массе достаточно высока. Поэтому нулевые колебания атомов гелия  $\frac{\hbar\omega}{2}$  имеют достаточно высокое числовое значение, а силы притяжения атомов за счет застроенности валентных оболочек малы. В результате атомы гелия и при низких температурах находятся в интенсивном движении, и гелий остается в жидком состоянии при температуре, близкой к абсолютному нулю. Жидкий гелий называют квантовой жидкостью, потому что причиной его редкого состояния является квантовый эффект – наличие нулевых колебаний, наличие нулевой энергии.

#### 8.3. Поведение микрообъектов на прямоугольном одномерном барьере. Тоннельный эффект

Рассматривается одномерное движение частицы с энергией E, по пути которой встречается потенциальный барьер U(x). График зависимости потенциальной энергии от координаты имеет форму прямоугольника (рис. 8.7).



Рис. 8.7

Если частица классическая, то в случае, когда энергия частицы  $E < U_0$ , она либо остановится на барьере (неупругий удар), либо отразится от барьера при упругом столкновении. В пределах под барьером, а тем более за его пределами, частица принципиально быть не может (под барьером кинетическая энергия частицы была бы отрицательной). Если энергия частицы  $E \ge U_0$ , частица снизит свою скорость в пределах действия барьера (или остановится), а после прохождения барьера снова примет начальную скорость.

Поведение квантового объекта подчиняется стационарному уравнению Шрёдингера (7.7) для одномерного движения. Так как движение в I, II и III областях (см. рис. 8.7) принципиально разное, необходимо составлять три уравнения, для каждой из областей движения отдельно:

$$\frac{d^{2}\Psi_{I}}{dx^{2}} + \frac{2mE}{\hbar^{2}}\Psi_{I} = 0;$$

$$\frac{d^{2}\Psi_{II}}{dx^{2}} + \frac{2m}{\hbar^{2}}(E - U_{0})\Psi_{II} = 0;$$

$$\frac{d^{2}\Psi_{III}}{dx^{2}} + \frac{2mE}{\hbar^{2}}\Psi_{III} = 0.$$
(8.17)

Если переместить существенно положительную величину  $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, k = \frac{2\pi}{\lambda}$  в уравнениях для I и III областей движения, получим дифференциальные уравнения гармонических колебаний:  $\frac{d^2 \Psi_{II}}{dx^2} + k^2 \Psi_{II} = 0; \quad \frac{d^2 \Psi_{III}}{dx^2} + k^2 \Psi_{III} = 0,$  решениями которых являются гармонические функции:

$$\Psi_{\rm I} = A_{\rm I} e^{ikx} + B_{\rm I} e^{-ikx}; \quad \Psi_{\rm III} = A_{\rm 3} e^{ikx} + B_{\rm 3} e^{-ikx},$$
 (8.18)

где составляющие с коэффициентами  $A_1$  и  $A_3$  соответствуют двигательным в положительном направлении оси Ox, а слагаемые с коэффициентами  $B_1$  и  $B_3$  – двигательные в обратном направлении, т. е. это отраженные волны. Но тогда  $B_3 = 0$ , потому что волне заведомо не от чего отражаться.

В области движения II имеем  $(E - U_0) < 0$ , поэтому, обозначив  $\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = \alpha^2, \alpha > 0$ , получим уравнение  $\frac{d^2 \Psi_{II}}{dx^2} - \alpha^2 \Psi_{II} = 0$ , решением которого являются обычные экспоненты:  $\Psi_{Ii} = A_2 e^{\alpha x} + B_2 e^{-\alpha x}$ , первая соответствует возрастанию, а вторая – убыванию амплитуды. Эти все решения графически представлены на рис. 8.7 в виде соответствующих синусоид и угасающих экспонентов на участке движения под барьером.

Для нахождения численных значений коэффициентов используются условия равенств  $\psi$ -функций и их первых производных на границах барьера x = 0 и x = 1, а также условия нормирования  $\psi$ -функции для общего движения. Не выполняя указанные процедуры, воспользуемся готовыми результатами для анализа выводов.

Во-первых, оказывается, что есть определенная вероятность частицы находиться под барьером, где классическая частица принципиально быть не может, не хватит ее энергии. Кинетическая энергия классической частицы принципиально не может быть отрицательной величиной. Для квантовой частицы, благодаря ее природе, благодаря существованию соотношений неопределенностей, точное разделение энергии на кинетическую и потенциальную невозможно, что дает возможность считать нахождение частицы в области под барьером не противоречащим обстоятельством. Более того, частица может существовать за пределами барьера с плотностью вероятностей  $\psi_{III}^2$ , что в общем случае не равно нулю. Возможность существования частицы за пределами барьера, прохождение частицы под барьером получило специальное название «*туннельный эффект*» – частица, фигурально выражаясь, прорывает туннель под барьером. Коэффициент прозрачности барьера с точностью численного коэффициента, близкого к единице

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)l}},$$
(8.19)

сильно зависит от высоты  $U_0 - E$  и от ширины l барьера.

Необычное, с точки зрения классической теории, поведение макрочастиц, тем не менее известное в оптике явление. Свет, падая под углом больше предельного угла полного внутреннего отражения, при расстоянии между двумя средами, где проходит свет, сопоставимый с длиной световой волны, проходит через барьер.

Если барьер имеет сложную форму, например, на рис. 8.8, исследования дают для коэффициента прозрачности выражение:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx}.$$
(8.20)





## Тема 9. ЭЛЕМЕНТЫ АТОМНОЙ ФИЗИКИ

- 9.1. Опыты Резерфорда. Ядерная модель атомов.
- 9.2. Постулаты Бора. Теория атома водорода по Бору.

#### 9.1. Опыты Резерфорда. Ядерная модель атомов

Атом – это наименьшая часть химического элемента, сохраняющего его основные физические и химические свойства. Представление о размерах и массе атомов дает молекулярно-кинетическая теория вещества. Атомы занимают размеры порядка  $10^{-10}$  м, имеют массу порядка  $10^{-27}$  кг, их концентрация, например в воде, порядка  $10^{29}$  м<sup>-3</sup> Атом – достаточно устойчивое образование, в нормальном состоянии он не излучает и не поглощает энергии. Излучение атомов имеет линейчатый спектр, характерен для каждого сорта атомов и, к примеру, для атомов водорода имеет достаточно простую зависимость:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \tag{9.1}$$

где  $\lambda$  – длина волны;

*R* – так называемая постоянная Ридберга;

*n*<sub>1</sub> и *n*<sub>2</sub> – числа натурального ряда.

В этой формуле поражает то, что это наиболее точная формула физики и, пожалуй, науки вообще, а единственными переменными являются числа натурального ряда – это не могло быть случайным, они должны иметь физическое содержание.

Изучение процессов электролиза и газовых разрядов привело исследователей к выводу, что атом имеет в своем составе отрицательно заряженную частицу, которая получила название «электрон». Установленный факт, а также факт излучения и поглощения энергии атомами приводит к выводу, что атом не является неделимой частью – он должен иметь внутреннюю структуру. Опытами Резерфорда и его учеников по бомбардировке атомов  $\alpha$ -частицами была установлена так называемая ядерная модель строения атомов. Атом в целом пуст, практически вся его масса и весь положительный заряд сконцентрированы в области с линейными размерами порядка  $10^{-15}$  м, в ядре атома, которое в сто тысяч раз меньше атома. Электроны в количестве достаточном для компенсации положительного заряда расположены в пространстве, занятом атомом. Поведение электронов в атомах не может быть на современном уровне установлено экспериментально – это вопрос теории.

Первая попытка теоретического осмысления результатов исследования принадлежит Резерфорду. По аналогии с солнечной системой он предлагает планетарную модель атома: в центре ядро, а электроны вращаются по орбитам, как планеты вокруг Солнца. Но такая модель оказалась неустойчивой. Дело в том, что электроны являются заряженными частицами и их движение по орбитам вокруг ядра ускорено. А ускоренное движение, согласно законам классической электродинамики, сопровождается электромагнитным излучением, исчерпывающим энергию электрона, как указывают на то расчеты, по порядку  $10^{-8}$  с, и атом должен прекратить существование. А ведь атомы устойчивы к образованию. Другое противоречие в том, что в таком атоме не может быть состояний без излучения и, кроме того, спектр излучения в противоречие опыту должен быть сплошным.

### 9.2. Постулаты Бора. Теория атома водорода по Бору

Более последовательная попытка спасти планетарную модель атома принадлежит датскому физику Нильсу Бору. Он предположил, что электрон в атоме не подчиняется законам классической электродинамики.

В качестве исходной принимается планетарная модель строения атомов.

Законы, которым подчиняется поведение электронов в атомах, Бор сформулировал в виде **постулатов**.

1. Электроны в атомах могут находиться на стационарных орбитах, не излучая и не поглощая энергию. При этом электроны и атом в целом имеют дискретный ряд значений энергии:

$$E_1, E_2, E_3, \dots, E_N \dots$$
 (9.2)

2. Только такие орбиты являются стационарными, для которых электрон имеет момент импульса относительно центра целочисленно кратным постоянной Планка:

$$L_n = mV_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (9.3)

3. Атомы излучают и поглощают электромагнитную энергию только при переходах между стационарными состояниями, при переходах электронов на менее удаленную от ядра стационарную орбиту происходит излучение, а при переходах на более отдаленные – поглощение в виде квантов электромагнитной энергии:

$$h\nu_{n_1n_2} = \hbar\omega_{n_1n_2} = E_{n_2} - E_{n_1}.$$
(9.4)

Для проверки правильности теории необходимо произвести расчет энергии и, воспользовавшись постулатами, рассчитать спектры атомов. Если теория не противоречива, она должна подтвердить известную по результатам исследования формулу (9.1).

С целью расчетов энергии атомов в стационарных состояниях Бор воспользовался законами классической электродинамики движения электрона, не последовательным, конечно. Рассматривается самая простая система – одноэлектронная – это атом водорода или водородоподобные ионы атомов (рис. 9.1).



Рис. 9.1

Электрон движется вокруг ядра под действием кулоновской силы, создающей центростремительное ускорение:

$$F_{\kappa} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{r_n^2} = \frac{mV_n^2}{r_n}.$$
(9.5)

Энергия электрона на *n*-й стационарной орбите (и атома в таком состоянии)

$$E_n = \frac{mV_n^2}{2} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{r_n}.$$
(9.6)

Скорость движения электрона и радиус соответствующей орбиты находятся путем совместного решения уравнений (9.3) и (9.5):

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{mZe^2}; \quad V_n = \frac{1}{n} \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}.$$
(9.7)

Согласно формуле (9.6) энергия в *п*-м состоянии

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{8\hbar^2 \varepsilon_0^2},$$
(9.8)

а согласно третьему постулату (формула (9.4)) имеем для кванта энергии:

$$hv_{n_1n_2} = h\frac{c}{\lambda_{n_1n_2}} = \frac{mZ^2e^4}{8h^2\epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right),\tag{9.9}$$

откуда следует, что

$$\frac{1}{\lambda_{n_1 n_2}} = \frac{mZ^2 e^4}{8h^3 c \varepsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \tag{9.10}$$

где

$$\frac{mZ^2e^4}{8h^3c\epsilon_0^2} = \frac{9,1\cdot10^{-31}(1,6\cdot10^{-19})^4}{8\cdot(6,63\cdot10^{-34})^3\,3\cdot10^8(8,85\cdot10^{-12})^2} = 1,08863\cdot10^7\,\mathrm{m}^{-1} = R$$

постоянная величина, которая для атома водорода очень хорошо совпадает с экспериментальным значением этой величины, известной под названием постоянной Ридберга. Таким образом получен триумфальный вывод, подтверждающий правильность, по крайней мере, непротиворечивость, теоретических ссылок. Идея квантования энергии атомов была подтверждена экспериментально в опытах Франка и Герца по исследованию способности поглощать энергию электронов атомами ртути в зависимости от их энергии.

Очень важным выводом теории Бора является факт квантования энергии атомов и выражение зависимости излучаемой энергии в виде разницы двух функций целых чисел:

$$hv_{21} = T(n_1) - T(n_2), \qquad (9.11)$$

так называемых спектральных термов, вывод, что находит свое подтверждение и в современной теории атомов. Но теория Бора имела ряд существенных недостатков. Построение теории уже следующего за одноэлектронными ионами атома гелия испытывало принципиальные трудности. Немецкий физик А. Зоммерфельд попытался подправить теорию Бора в ее применении к многоэлектронным атомам, выполнив синтез квантовой теории и теории относительности. Была разработана квантовая теория эллиптических орбит электронов, известная как теория Бора – Зоммерфельда. Были введены другие квантовые числа, что позволило объяснить известные из практической спектроскопии закономерности в атомных спектрах. Тем не менее теория Бора и теория Бора – Зоммерфельда не являются современными последовательными теориями. С самого начала теория Бора не последовательна ни квантовой, ни классической теории, она имеет искусственное сочетание квантовой теории и классической электродинамики. Кроме того, главное квантовое число, определяющее собой значение энергии атома, вводится через постулат 2, определяющее значение момента импульса электрона относительно центра вращения. По современным представлениям (подтвержденным опытам, связанным с исследованием поляризации электромагнитного излучения атомов) значение этого квантового числа начинается с нуля, что не может быть понято с позиций теории Бора.

Современной теорией атомных структур является квантовая механика, базирующаяся на представлениях о волновой природе микрообъектов, которая проявляется в специфических условиях, о чем была речь выше и будут рассмотрены некоторые, необходимые для понимания дальнейших исследований, обобщения теоретического метода.

## 10. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОБНЫХ ИОНОВ

10.1. Общее уравнение Шрёдингера.

10.2. Уравнение Шрёдингера для атома водорода и водородоподобных ионов. Квантование энергии, момента импульса и проекции момента импульса.

10.3. Вырожденные состояния электрона и кратность их вырождения по энергии. Спектр атома водорода и водородоподобных ионов.

10.4. Состояния электронов в атоме водорода. Электронные облака. Электронные орбитали.

10.5. Спин электрона. Опыты Штерна и Герлаха. Состояния электронов в атоме водорода и водородоподобных ионах.

### 10.1. Общее уравнение Шрёдингера

Стационарное уравнение Шрёдингера можно переписать более компактно:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi = W\psi$$
или  $\hat{H}\psi = W\psi,$  (10.1)

где  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$  – означает последовательность действий, которые

необходимо выполнить над ψ-функцией, чтобы получить правую часть уравнения. Это так называемый оператор энергии, или оператор Гамильтона.

Особенность уравнения (10.1) заключается в том, что действие оператора на  $\psi$ -функцию приводит к ее умножению на число. Такие числа называются собственными значениями оператора энергии, а  $\psi$ -функции, удовлетворяющие такому уравнению и, конечно, стандартным условиям, – его собственными функциями.

Стационарное уравнение Шрёдингера в виде (10.1) позволяет обобщить его на случай исследования других динамических характеристик. Оказывается, что каждой динамической характеристике q соответствует оператор  $\hat{Q}$ . Связь между операторами такая, как между соответствующими динамическими характеристиками в динамике ма-

териальной точки. Такой подход позволяет определить эти операторы. После чего составляется операторное уравнение

$$\hat{Q}\psi = q\psi, \qquad (10.2)$$

которое решается на параметре в состоянии с собственной,  $\psi_i$ -функция определяется по законам статистической теории: поиск собственных значений оператора и собственных функций. Значение

$$q_i = \left\langle q_i \right\rangle = \int_V \psi_i^{\otimes} \hat{Q} \psi_i dV, \qquad (10.3)$$

где V – объем пространства существования частицы;

 $\psi_i$  и  $\psi_i^{\otimes}$  – соответственно  $\psi$ -функция и комплексно сопряженная функция в *i*-м состоянии.

Угловые скобки символа параметра означают, что определяется среднее статистическое значение для исследуемого состояния. Квадрат модуля  $\psi_{\rm I} - \phi$ ункции  $|\psi_i|^2 = \psi_i \psi_i^{\otimes}$  определяет пространственное распределение плотности вероятности наблюдать частицу в *i*-м состоянии – облако вероятности, например, электронное облако в атоме.

Таким образом, происходит полное исследование поведения микрообъектов. Определяются значение их динамических характеристик и пространственное распределение плотности вероятности наблюдать частицу. Состояние квантовой частицы задается распределением вероятностей реализации на спектре разрешенных (собственных) значений параметров:

#### 10.2. Уравнение Шрёдингера для атома водорода и водородоподобных ионов. Квантование энергии, момента импульса и проекции момента импульса

Принимается ядерная модель строения атома. Для водорода и водородоподобных ионов есть массивное положительное ядро и один электрон. Ядро считается неподвижным. Задание теории: выяснить поведение электрона. Потенциальная энергия электрона

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{10.5}$$

не зависит от времени и имеет сферическую симметрию. Поэтому движение электрона будем изучать с помощью стационарного уравнения Шрёдингера (10.1) или (10.2) в сферической системе координат (рис. 10.1).



Рис. 10.1

Движение электрона характеризуется энергией E, орбитальным моментом импульса по отношению к центру атома  $\vec{L}$ , а также важное значение имеет исследование проекции орбитального момента импульса на направление внешнего магнитного поля Lz. Соответственно составляются и решаются стационарные уравнения:

- для энергии –

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$
 где  $\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi,$  (10.6)

где  $\Delta = \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$  – оператор Лапласа

в сферической системе координат (*r*, θ, φ);

- для модуля момента импульса —

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi, \qquad (10.7)$$

ОТ

куда 
$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi} = -\hbar^2 \left( \frac{1}{i\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} -$$
оператор

квадрата орбитального момента импульса;

- для проекции орбитального момента импульса в направлении магнитного поля –

$$\hat{L_z} \psi = L_z \psi, \qquad (10.8)$$

где  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$  – оператор проекции момента импульса.

Последнее уравнение достаточно простое, на нем проиллюстрируем механизм получения результатов с помощью уравнения Шрёдингера. Перепишем это уравнение:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial z} = L_z\psi. \tag{10.9}$$

Уравнение (10.9) решается путем разделения переменных:

$$\frac{\partial \Psi}{\Psi} = \frac{L_z}{-i\hbar} \partial z = i \frac{L_z}{\hbar} \partial z.$$
(10.10)

Как известно, решение уравнения (10.10) приводит к следующему результату:

$$\Psi = e^{i\frac{L_z}{\hbar}\varphi} = e^{im\varphi}, \qquad (10.11)$$

где  $m = \frac{L_z}{\hbar}$ .

Полученное значение у-функции должно удовлетворять стандартным требованиям и однозначность этой функции означает, что

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi}e^{im2\pi},$$
 (10.12)

но такое равенство возможно только при условии, что m = 0, 1, 2, 3, ...,т. е. принимает значение чисел натурального ряда. Учитывая соотношение (10.10), имеем:

$$L_{z} = m\hbar, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (10.13)

Уравнения (10.7) и (10.6) имеют решение в виде так называемых слоевых функций, удовлетворяющих стандартным требованиям только при условии, что

$$\frac{L^2}{\hbar^2} = l(l+1)$$
, т. е. что  $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ , где  $l = 0, 1, 2, 3, ..., (10.14)$ 

и что

$$E = -\frac{1}{\left(n_r + l + 1\right)^2} \frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2}, \quad \text{где} \quad n_r = 0, \ 1, \ 2, \ 3, \dots .$$
(10.15)

Как правило, выражение  $n_r + l + 1$  обозначают буквой n: n = nr + l + 1. Учитывая соответствующие значения  $n_r$  и l из выражений (10.14) и (10.15), имеем

$$n = 1, 2, 3, ...; l \le n-1; l = 0, 1, 2, ..., (n-1)...$$
 (10.16)

Целые числа n, l, m называются квантовыми числами:

*n* – главное квантовое число, так как определяет главный параметр состояния электрона в атоме – его энергию:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} = -\frac{Z^2}{n^2} E_0,$$
(10.17)  
откуда  $E_0 = \frac{me^4}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} = 13,6$  эВ;  $n = 1, 2, 3, ...;$ 

*l* – орбитальное квантовое число, так как определяет орбитальный момент импульса (по формуле (10.14));

*т* – магнитное квантовое число, оно определяет разрешенные значения проекции орбитального момента импульса на направление внешнего магнитного поля (по формуле (10.15)) и одновременно значение проекции на это же направление магнитного орбитального момента электрона:

$$(p_m)_z = \frac{e}{2m_e}L_z = m\frac{e\hbar}{2m_e} = m\mu_{\rm B}; \ m = 0, \ \pm 1, \ \pm 2, \ \dots, \ \pm l, \ (10.18)$$

где  $\frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_{\rm b} = 0,927 \cdot 10^{-23} \,\mathrm{A} \cdot \mathrm{m}^2$  – магнетон бора.

Обратим внимание на тот факт, что квантующаяся (принимающая дискретный ряд разрешенных значений) только проекция момента импульса на направление внешнего поля. Другие проекции *Lx* и *Ly* могут принимать произвольные (в пределах разрешенного) значения (рис. 10.2).





Такое поведение орбитального момента импульса электрона носит название пространственного квантования. Возможность принимать нулевые значения как для модуля момента импульса (см. формулу (10.14)) и его проекций (см. формулу (10.13)), во-первых, вытекает из физического смысла получаемых квантовой механикой значений характеристик движения как среднестатистических значений по состоянию, а во-вторых, находит экспериментальное подтверждение.

#### 10.3. Вырожденные состояния электрона и кратность их вырождения по энергии. Спектр атома водорода и водородоподобных ионов

Из приведенных выше результатов следует тот факт, что состояние электрона в атоме водорода (и водородных ионах) определяется у-функцией, зависит от всех трех квантовых чисел: главного, орбитального и магнитного, а энергия электрона определяется только главным квантовым числом (см. формулу (10.17)). Оказывается, что несколько разных состояний электрона в атоме обладают одинаковой энергией. Такие состояния электронов называются вырожденными (по энергии), а количество вырожденных состояний – кратностью вырождения. Произведем подсчет кратности вырождения состояний электронов у атома водорода.

Учитывая соотношение (10.16) и (10.18) между значениями квантовых чисел, получим для кратности вырождения:

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{2(n-1)+1+1}{2}n = n^2.$$
(10.19)

Это значит, что все состояния электронов в атоме водорода и водородных ионах  $n_2$  – кратно вырожденные по энергии.

Из выражения потенциальной энергии электрона (10.5) следует, что электрон в атоме водорода движется в гиперболической потенциальной яме (рис. 10.3). За пределами атома энергия электрона равна нулю и может принимать произвольные значения, внутри атома энергия отрицательная и принимает дискретный ряд значений – квантуется (см. формулу (10.17)).



Рис. 10.3

Излучение энергии происходит при переходах между стационарными состояниями электрона (см. рис. 10.3) в виде кванта электромагнитной энергии:

$$\hbar\omega_{n_1n_2} = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{Z^2 m e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \qquad (10.20)$$

хорошо согласуется с экспериментальной сериальной формулой (10.1), а также и с формулой (10.10), вытекающей из теории Бора, но целые числа имеют смысл главных квантовых чисел, и она получена последовательными методами квантовой механики. Информация, полученная в процессе исследования атома водорода квантовой механики, значительно богаче: это и значение момента импульса и пространственная ориентация вектора момента импульса, находящего экспериментальное подтверждение.

#### 10.4. Состояния электронов в атоме водорода. Электронные облака. Электронные орбитали

Как известно из положений квантовой механики и как было указано в предыдущем пункте, состояния электрона в атоме водорода и водородных ионах определяются  $\psi$ -функцией, которая, в свою очередь, зависит от тройки квантовых чисел:  $\psi(r, 9, \varphi) = \psi_{n,l,m_l}$ . Структура уравнений Шрёдингера (10.6), (10.7) и (10.8) дает возможность использовать подстановку Фурье, позволяющую представить  $\psi$ -функцию в виде произведения радиальной и сферической частей:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = \Psi_{n,l,m_l} = R_n(r) Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi).$$
(10.21)

Некоторые из функций, представляющих радиальные и сферические части *ψ*-функции для атома водорода приведены ниже:

$$R_{10} = 2a^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{a}}; R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a^3}}e^{-\frac{r}{2a}}; R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a^3}}e^{-\frac{r}{2a}}\cdot\frac{r}{a};$$
  

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cdot\cos\vartheta; Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\cdot\sin\vartheta;$$
  

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}\cdot\left(\frac{3}{2}\cos^2\vartheta - \frac{1}{2}\right)},$$
  
(10.22)

где  $a = r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,526 \,(\text{м})$  – радиус первой орбиты электрона в

атоме водорода по теории Бора (см. формулу (9.7)) – так называемый *первый боровский радиус*, принятый в качестве константы для измерения атомных расстояний.

Физическое содержание полученных решений проявляется через определение квадратов модулей  $\psi$ -функций, дающих возможность рассчитать плотности соответствующих вероятностей  $\rho(r, \vartheta, \varphi)$ нахождение электронов в точках атома с координатами ( $r, \vartheta, \varphi$ ).

Графические изображения пространственных распределений плотностей вероятностей нахождения электронов в заданных состояниях в атомах соответствующими плотностями точек (в условных единицах) имеют форму облаков разной плотности, поэтому они получили название электронных облаков. Электронные облака для некоторых состояний электронов в атоме водорода представлены на рис. 10.4.



 $2p \ m = 0 \qquad \qquad 3p \ m = 0$ 

Рис. 10.4

Электронные облака не имеют четких границ в пространстве. Для определения и изображения формы электронного облака вводится понятие электронной орбитали – поверхности, передающей форму электронного облака и гарантирующей вероятность нахождения электрона внутри нее, например, 90 %. Орбитали *ns* имеют форму сферы; орбитали *np* – форму гантелей и т. д. Основное состояние электронов, состояние 1*s*, в атомах водорода изображается сферической орбиталью (рис. 10.5); возбужденное состояние 2p – гантелевидными орбиталями и т. д.



Для определения вероятности нахождения электрона на расстоянии *r* от ядра вводится соответствующая плотность вероятности:  $\rho(r) = \frac{dP(r)}{dr}$ , где  $dP(r) = |\psi(r)|^2 dV = |R(r)|^2 4\pi r^2 dr$  – вероятность нахождения электрона в сферическом слое толщиной *dr* и объемом  $dV = 4\pi r^2 dr$ . Таким образом,

$$\rho(r) = \frac{dP(r)}{dr} = 4\pi r^2 \left| R(r) \right|^2.$$
(10.23)

Графики зависимости  $\rho(r)$  для некоторых состояний электрона представлены на рис. 10.6. Пунктиром на рис. 10.6 изображены графики зависимости  $|R(r)|^2$  от r.



Рис. 10.6

### 10.5. Спин электрона. Опыты Штерна и Герлаха. Состояния электронов в атоме водорода и водородоподобных ионах

Уравнение Шрёдингера описывает поведение микрочастиц, двигающихся с дорелятивистскими скоростями, поэтому оно не учитывает аспекты внутреннего движения электронов. Опыт учит, что электрон имеет степень свободы внутреннего движения, которое проявляется в наличии спина электрона – его собственного момента импульса L<sub>s</sub>

и связанного с ним спинового магнитного момента  $\vec{p}_{ms} = -\frac{e}{m_e}\vec{L}_s$ ,

где  $\frac{p_{ms}}{L_s} = -\frac{e}{m_e} = \gamma_s$  – спиновое гиромагнитное отношение, которое в

два раза больше орбитального гиромагнитного отношения.

Опыты, проведенные Штерном и Герлахом, подтвердили наличие этих характеристик у электронов и указали на то, что в пространстве проекция спина на направление магнитного поля может принимать только два значения:  $L_{sz} = \pm \frac{1}{2}\hbar$ , где  $ms = \pm 1/2 - спиновое$  магнитное число, а  $\sigma = 1/2$  называют просто спином электрона, хотя в действительности спин, т. е. собственный момент импульса электрона,  $L_s = \hbar \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ , в соответствии с соотношением (10.14).

Таким образом, состояние электрона в атоме, т. е.  $\psi$ -функция электрона, определяемая четырьмя квантовыми числами: главным n, определяющим (в основном) значение энергии атома; орбитальным l, определяющим модуль орбитального момента импульса электрона; магнитным ml, определяющим проекцию орбитального момента импульса на направление магнитного поля; спиновым ms, определяющим значение проекции спина на направление внешнего магнитного поля. Обращает внимание факт, что энергия электрона в атоме зависит только от главного квантовых числа, а его состояние зависит от четырех квантовых чисел, т. е. несколько состояний электрона в атоме имеют одинаковую энергию. Такие состояния электрона называются *вырожденными по энергии*. Количество таких состояний,  $N = 2n^2$ , называется *кратностью вырождения*.

Условно состояние электрона в атоме обозначают двумя квантовыми числами – главным и орбитальным, с указанием кратности его вырождения: *nlN*. По обычаю практической спектроскопии главное число обозначается цифрой 1, 2, 3, ..., а орбитальное – буквами

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$
  
 $s, p, d, f, \dots$ 

Например, состояние, в котором n = 1, а l = 0, обозначается как  $1s_2$ , где индекс 2 означает кратность вырождения:  $N = 2 \cdot 1^2 = 2$ .

Полученные соответствующие каждому состоянию электрона ψ-функции позволяют построить распределение плотности вероятности его нахождения в атоме – электронные облака и воспроизводящие их форму электронные орбитали (см. текст этого пункта темы выше).

Примеры состояний электронов в атоме водорода и водородных ионах приведены в табл. 10.1.

п	l	$m_l$	ms	Формула состояния	Общая кратность вырождения
1	0	0	±1/2	$1s^2$	2
2	0	0	±1/2	$2s^2$	
	1	-1	±1/2	$2p^6$	8
		0	±1/2		
		1	±1/2		
3	0	0	±1/2	$3s^{2}$	
	1	-1	±1/2	3 <i>p</i> <sup>6</sup>	18
		0	±1/2		
		1	±1/2		
	2	-2	±1/2	3 <i>d</i> <sup>10</sup>	
		-1	±1/2		
		0	±1/2		
		1	±1/2		
		2	±1/2		

Гардина 101 П	пимены состоянии	<b>DIEKTNOHOR R</b>	ятоме волородя
1 аолица 10.1. н	римеры состоянии	STERTPOHOD D	атомс водорода

#### Тема 11. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

11.1. Особенности исследования многоэлектронных атомов квантовой механики. Энергетические слои. Принцип Паули. Принцип неразличимости тождественных частиц. Объяснение закономерностей таблицы элементов.

11.2. Рентгеновское излучение. Сплошной и линейчатый рентгеновские спектры.

## 11.1. Особенности исследования многоэлектронных атомов квантовой механики. Энергетические слои. Принцип Паули. Принцип неразличимости тождественных частиц. Объяснение закономерностей таблицы элементов

Принимается ядерная модель строения атома: в центре атома положительное ядро с зарядом Ze и в области с линейными размерами порядка  $10^{-10}$  м находятся Z электронов. Проблема состоит в исследовании поведения электронов в атоме. Она значительно усложнена по сравнению с одноэлектронной задачей. Исследуемый электрон взаимодействует не только с ядром, но также с каждым из Z-1 движущихся электронов, их взаимодействие значительно усложняет потенциальную функцию, которая, кроме того, будет зависеть от времени; такое движение не стационарно. Хотя составление уравнения Шрёдингера для исследования многоэлектронного атома не испытывает принципиальных трудностей, его решение в виде аналитических точных функций, по крайней мере на современном уровне развития математики, невозможно.

Для исследования поведения электронов в многоэлектронных атомах употребляются приближенные способы. Одним из них является метод *адиабатического приближения*. Он исходит из того, что ядро достаточно массивное по сравнению с электронами и его считают неподвижным, а электроны, напротив, двигаются довольно быстро, поэтому электрический заряд электронов можно считать размытым в пространстве с плотностью  $\frac{dq}{dV} = |\psi|^2 e$ . Таким образом, все электроны, кроме исследуемого, могут быть учтены с помощью некоторого экранирующего заряда ядра эффекта, т. е. можно считать, что исследуемый электрон движется в центральном поле ядра с зарядом  $(Z - \sigma)e$ ,  $\sigma$  – *постоянное экранирование*, которое учитывает влияние остальных электронов. В таком подходе задача сводится к одноэлектронной и, конечно, выводы получим такие же. Состояние электронов определяется четверкой квантовых чисел, и электронные облака имеют такую же конфигурацию в соответствующих состояниях; модуль их орбитального момента импульса и его проекция на направление магнитного поля квантуются (см. формулы (10.14) и (10.13)); энергия атома также квантуется (см. формулу (10.17)) и принимает значение

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m(Z-\sigma)^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} = -\frac{(Z-\sigma)^2}{n^2} E_0, \quad \text{где} \quad n = 1, 2, 3, \dots . \quad (11.1)$$

По принципу минимума энергии все электроны атома должны находиться в состоянии 1s с энергией  $E_1$ . Но опыт, основанный на изучении потенциалов ионизации (т. е. напряжения, необходимого для удаления каждого из электронов за пределы атома), коэффициентов поглощения рентгеновского излучения определенной длины волны разными атомами, свидетельствует, что электроны в атоме находятся в разных энергетических состояниях. Анализ экспериментальных результатов позволил В. Паули сформулировать принцип, позволяющий понять закономерности расположения электронов в атоме. Принцип Паули утверждает, что в квантовой системе не может существовать два электрона в одинаковом состоянии, с одинаковой четверкой квантовых чисел. Этот принцип является следствием более общего принципа неразличимости (принцип запрета) тождественных квантовых частиц. Принцип неразличимости основан на том факте, что состояние квантового объекта определяется у-функцией, а измеряемой величиной является квадрат ее модуля  $|\psi|^2 = \psi \psi^*$ . Среди квантовых объектов есть такие, что их состояние описывается либо четными, либо нечетными *ψ*-функциями. Одинаковому квадрату модуля *ψ*-функции могут соответствовать четные и нечетные у-функции. Но суперпозиция нечетных у-функций дает ноль, поэтому частиц, состояние которых описывается нечетными у-функциями, не может быть больше одной в заданном состоянии. Такими частицами, как оказывается, являются частицы с полуцелыми спинами:  $\sigma = 1/2, 3/2, 5/2, ...$  Напротив, частицы, состояние которых описывается парными функциями, это частицы с нулевым или целочисленным спином: σ = 0, 1, 2, ..., являются коллективистскими частицами и могут накапливаться в заданном состоянии в произвольных количествах; такими частицами являются напри-
мер, фотоны. Принцип Паули и, как более общий, принцип неразличимости вводятся в аппарат квантовой механики искусственно.

Из принципа Паули и принципа минимума энергии следует, что электроны в атоме расположены за энергетическими слоями (энергетическими оболочками), в которых не может быть больше электронов, чем кратность вырождения данного состояния, т. е. чем  $N = 2n^2$  электронов. По символике, принятой в практической спектроскопии, энергетические слои обозначаются буквами латинского алфавита: для n = 1, N = 2 -это K-слой;  $n = 2, N = 2 \cdot 2^2 = 8 -$ это L-слой;  $n = 3, N = 2 \cdot 3^2 = 18 -$ это M-слой;  $n = 4, N = 2 \cdot 4^2 = 32 -$ это N-слой и т. д. (рис. 11.1).



Рис. 11.1

В невозбужденном состоянии электроны атомов занимают состояния с наименьшей энергией из возможной. Наиболее энергичные электроны находятся на так называемом валентном уровне. На рис. 11.1 валентные электроны находятся в *М*-слое, из них три валентных электрона. Символическая формула электронной конфигурации такого атома  $1s^22s^22p^63s^23p^1$ . Обратим внимание на то, что изображены энергетические слои и радиусы их энергетические, т. е. определяющие энергию слоя.

Выполненные исследования позволяют понять закономерности расположения химических элементов в периодической таблице элементов и периодичность их химических свойств, обусловленных поведением валентных электронов.

Атом водорода имеет один электрон в К-слое, который является валентным электроном, т. е. водород – одновалентный элемент, он хорошо вступает в химические реакции, проявляет металлические свойства. Атом гелия имеет два насыщающих его электрона в К-слое. Энергия ионизации К-электронов гелия 20,2 эВ – гелий инертный газ. Гелий заканчивает первый период в таблице элементов. Следующий период начинается элементом лития, в котором третий электрон по принципу Паули уже не может находиться в К-слое и занимает самое низкое энергетическое положение в L-слое. Одновалентный литий проявляет металлические свойства. Второй период заканчивается инертным газом неоном, у которого *L*-слой становится заполненным. Последовательность заполнения энергетических слоев сохраняется до атома аргона, у которого 18 электронов, и аргон является инертным газом, заканчивающим третий период. Следующий 19-й электрон атома калия должен принадлежать также М-слою, но химические и оптические свойства калия, как указывает опыт, аналогичны свойствам первой группы Li и Na, у которых валентный электрон находится в s-состоянии. Это возможно, когда 19-й электрон перейдет к N-слою в состояние 4s. Приближенные методы исследования не позволяют понять такое явление, но всеобщие соображения позволяют дать ему толкование. Дело в том, что в рассмотренном выше приближенном методе не учтено возможное влияние остальных электронов на зависимость энергии изучаемых электронов от величины и пространственной ориентации во внутреннем магнитном поле электронов момента импульса и магнитного момента электрона. Такое влияние, конечно, существует, и поэтому энергетические слои распадаются на подслои, т. е. снимается вырождение состояний. Энергия электронов зависит от всех четырех квантовых чисел, что и приводит к тому, что энергия 4s-подслоя меньше энергии 3d-подслоя. Имея такое объяснение, которое количественно формулируется в виде вспомогательных принципов, закономерности расположения элементов и особенность их химических и оптических свойств полностью понятна.

## 11.2. Рентгеновское излучение. Сплошной и линейчатый рентгеновские спектры

Как указывают теоретические исследования, представленные выше, и опыт, электромагнитное излучение и поглощение атомов в оптическом диапазоне связано с переходами между их валентным уровнем и возбужденными уровнями энергии. Переходы электронов между внутренними энергетическими слоями или переходы между возбужденными и внутренними состояниями связаны с большими изменениями энергии и соответствуют излучению рентгеновского диапазона.

Технически рентгеновское излучение образуется в устройствах, носящих название рентгеновских трубок (рис. 11.2). Стеклянный прозрачный баллон, в котором поддерживается давление порядка  $10^{-6}$  мм. рт. ст. и вмонтированы два электрода: накаленный катод K и антикатод AK. Между электродами поддерживается высокая разность потенциалов порядка десятков тысяч вольт. Сфокусированный пучок электронов, разогнанных электрическим полем, попадает на антикатод. Взаимодействие энергичных электронов с материалом антикатода приводит к возникновению рентгеновского электромагнитного излучения с длинами волн меньше  $10^{-10}$  м.



Рис. 11.2

Исследования указывают на то, что рентгеновский спектр имеет две разные составляющие (рис. 11.3). Во-первых, это излучение со сплошным спектром, так называемое белое, не зависящее от материала катода, а его интенсивность и распределение по длинам волн полностью определяется величиной приложенной разности потенциалов. Очень важным признаком белого излучения является существование коротковолнового предела  $\lambda_0$  (см. рис. 11.3), который подчиняется опытному соотношению:

$$\lambda_0 = \frac{1,24}{U} \text{ M},$$
 (11.2)

где напряжение выражено в киловольтах.



Рис. 11.3

С увеличением напряжения на сплошной спектр накладывается так называемое *характеристическое излучение*, имеющее линейчатый спектр и полностью зависящее от материала антикатода. Линии характеристического излучения сгруппированы по сериям *K*, *L*, *M*-серии. В каждой серии линии обозначаются как  $K_{\alpha}$ ,  $K_{\beta}$ ,  $K_{\gamma}$ , ...;  $M_{\alpha}$ ,  $M_{\beta}$ , ...;  $L_{\alpha}$ ,  $L_{\beta}$  и т. д. Исследование зависимости частоты, соответствующей линии  $K\alpha$ , от природы вещества антикатода установил английский физик Мозли (*закон Мозли*):

$$\sqrt{\frac{\nu_{K\alpha}}{R}} = \sqrt{\frac{3}{4}} \left( Z - \sigma \right), \tag{11.3}$$

σ – постоянное экранирование;

*R* – постоянная Ридберга.

Закон Мозли позволил уточнить, что элементы в периодической таблице расположены зарядами их ядер.

Сплошной рентгеновский спектр является результатом электромагнитного излучения электронов, разогнанных электрическим полем трубки во время их ускоренного движения в результате торможения при прохождении у ядер вещества антикатода. Ускорение движения электронов, и частота, и интенсивность излучения зависят от прицельного расстояния до ядра и могут изменяться плавно в широком диапазоне, но существование коротковолнового предела белого рентгеновского спектра не может быть понято в рамках классических представлений об электромагнитном излучении как о волнах определенного диапазона и находит полное качественное и количественное объяснение в рамках квантовых представлений. Действительно, приобретя энергию eU в электрическом поле рентгеновской трубки, электрон может ее излучить максимально в виде одного кванта:

$$hv_0 = \frac{hc}{\lambda_0} = eU \to \lambda_0 = \frac{hc}{eU} = \frac{1,24}{U} \cdot 10^{-3} (M),$$
 (11.4)

что в точности соответствует экспериментальному закону (11.2).

Характеристическое излучение является результатом переходов электронов атомов вещества антикатода на внутренних энергетических уровнях и полностью согласуется с теоретическими соотношениями. Действительно, под действием энергичных электронов выбиваются электроны из внутренних электронных слоев и, заполняясь за счет более энергичных внешних электронов, излучают соответствующие кванты энергии:

$$hv_{nk} = E_k - E_n = \frac{m(Z - \sigma)^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) = (Z - \sigma)^2 E_0 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad (11.5)$$

где

$$n = 1, 2, 3, ...$$
  
 $k = n + 1, n + 2, ...$ 

Из соотношения (11.5) для линия  $K_{\alpha}$ , т. е. для перехода электронов со второго энергетического слоя в первый (k = 2, n = 1)

$$v_{21} = v_{K\alpha} = (Z - \sigma)^2 \frac{E_0}{h} \cdot \frac{3}{4},$$
 (11.6)

что согласуется с законом Мозли.

#### Тема 12. МОЛЕКУЛЫ. МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СПЕКТРЫ

12.1. Молекулы. Виды химических связей и типы молекул. Ковалентная связь.

12.2. Особенности молекулярных энергетических спектров. Комбинационное рассеяние. Понятие о радиоспектроскопии.

12.3. Поглощение и излучение энергии молекулами. Вынужденное излучение. Принципы работы квантовых генераторов.

#### 12.1. Молекулы. Виды химических связей и типы молекул. Ковалентная связь

Молекулами называются наименьшие частицы вещества, сохраняющие его основные химические и физические свойства. Молекулы состоят из двух или большего количества одноименных или разноименных атомов (в полимерных молекулах их могут быть тысячи). Тот факт, что молекулы являются устойчивыми образованиями, свидетельствует о существовании сил, удерживающих атомы в молекуле. Экспериментальные исследования и теоретические расчеты позволили установить зависимость результирующих внутримолекулярных сил от расстояния между атомами. На рис. 12.1 представлено схематическое изображение зависимости потенциальной энергии взаимодействия двух атомов. На расстояниях, значительно превышающих размер атомов, силы их взаимодействия стремятся к нулю. С приближением атомов появляются силы их взаимного притяжения, которые на неких расстояниях порядка размеров атомов переходят в силы отталкивания. На некотором, характерном для данных двух атомов расстоянии r<sub>0</sub> устанавливается равновесие сил притяжения и отталкивания и соответствует минимальной потенциальной энергии взаимодействия атомов (см. рис. 12.1). Это расстояние называется длиной химической связи и соответствует минимальной энергии химической связи D.

Исследования оптических и рентгеновских спектров излучения молекул указывают на то, что основные изменения происходят на уровне оптических спектров, что принципиально отличается от спектров изолированных атомов. Рентгеновские диапазоны, связанные с переходами электронов на внутренних энергетических состояниях электронов в атомах, остаются фактически постоянными при вхождении атомов в молекулы. Таким образом, процессы образования молекул обусловлены в основном поведением внешних валентных электронов, отвечающих за оптическое излучение.



Рис. 12.1

Исследование процессов диссоциации молекул указывает на то, что молекулы распадаются либо на ионы, либо на нейтральные атомы, что соответствует и движению двух типов химической связи: *ионной (ге-терополярной)* и *атомной (гомеополярной)*.

В случае ионной связи (*ионные молекулы* NaCl, NaF, LiF...) с приближением атомов наступает момент, когда валентный электрон одного из атомов присоединяется ко второму атому. Потерявший электрон атом ведет себя как положительно заряженная частица с зарядом +e, а атом, получивший лишний электрон, – как частица с отрицательным зарядом -e. Потенциальная энергия взаимодействия между ними  $u^2$ 

 $U = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ , где *r* – расстояние между центрами двух ионов.

В качестве примера рассмотрим процесс образования молекулы *LiF*. Так как энергия ионизации лития 5,4 эВ, а электронное родство фтора 3,6 эВ, то результирующая энергия, необходимая для того, чтобы удалить электрон лития и присоединить его к атому фтора, составляет 5,4 эВ – 3,6 эВ = 1,8 эВ. Если оба иона находятся на расстоянии  $r = 8 \cdot 10^{-10}$  м, то U = 1,8 эВ. Соответственно, на расстояниях, меньше  $r = 8 \cdot 10^{-10}$  м, внешний электрон лития, перейдя к атому фтора, окажется в состоянии с меньшей энергией. Минимум энергии достигается на расстоянии  $r_0 = 1,5 \cdot 10^{-10}$  м, что соответствует энергии химической связи 4,3 эВ и устойчивой молекуле *LiF*.

Атомными (гомеополярными) называются молекулы, образовавшиеся в результате слияния двух нейтральных атомов. Химическая связь атомов в гомеополярных молекулах называется ковалентной связью. Ковалентная связь имеет ряд особенностей, которые не могут быть объяснены в пределах классических представлений. Ковалентная связь обладает свойством *насыщенности*, выражающейся в валентности атомов, и зависит от *ориентации спинов* валентных электронов. Указанные свойства принципиально отсутствуют у таких классических сил, как гравитационные и электромагнитные. Ковалентная связь кроме молекул типа  $H_2$  наблюдается у большого количества неорганических соединений и у многих органических молекул (второводород HF, оксид азота NO, аммиак NH<sub>3</sub>, метан CH<sub>4</sub> и др.). Простейшей молекулой с ковалентной связью является молекула водорода  $H_2$ , состоящая из двух протонов и двух электронов.

При наличии двух протонов энергия связи электрона становится більше, чем с одним протоном. Кроме того, электростатическое отталкивание протонов стремится разорвать связь. Но, благодаря неузнаваемости электронов (как тождественных частиц), каждый из них находится некоторое время в окружении другого протона, которому он «не принадлежал». При этом электронное результирующее облако имеет тенденцию сосредотачиваться в пространстве между двумя протонами, создавая объемный отрицательный заряд  $|\psi|^2 e$ , к которому притягиваются протоны, что приводит к образованию особой *квантовомеханической обменной связи*, которая зависит, в свою очередь, от ориентации спинов электронов.

Из квантовомеханических расчетов следует, что при приближении двух атомов водорода на расстоянии, сопоставимом с первым боровским радиусом, при условии антипараллельных спинов электронов в атомах, возникают силы притяжения атома тем больше, чем ближе протоны. Квантовомеханические ковалентные силы стремятся к полному перекрытию электронных облаков, но электростатические силы отталкивания протонов им противодействуют, и игра этих сил приводит к определенной конфигурации молекулы водорода с расстоянием между протонами  $r_0 = 0.74 \cdot 10^{-10}$  м и энергией химической связи D = 4,718 эВ (см. рис. 12.1). При параллельных спинах электронов оба атома водорода отталкиваются друг от друга и молекула не образуется.

## 12.2. Особенности молекулярных энергетических спектров. Комбинационное рассеяние. Понятие о радиоспектроскопии

Не учитывая энергию движения молекул как целого и исходя из того, что ядерных преобразований не происходит, можно тем не менее утверждать, что у молекул, в отличие от атомов, существуют особые механизмы изменения энергии, кроме энергии электронного происхождения. Это механизмы изменения энергии, связанные с движением отдельных атомов или отдельных ядер, входящих в состав молекулы, с их взаимным вращением и колеблющимися движениями. В первом приближении можно считать, что все эти виды энергии взаимно независимы:

$$E = E_{\mathfrak{I}\mathfrak{I}} + E_{\kappa\mathfrak{I}\mathfrak{I}} + E_{\mathfrak{o}\mathfrak{I}}, \qquad (12.1)$$

где *Е*<sub>эл</sub> – энергия электронного происхождения;

*Е*кол – энергия колеблющегося движения молекул;

Еоб – энергия вращательного движения молекул.

Энергия электронного происхождения, как известно из теории атомов, квантовая и на расстояние между энергетическими уровнями порядка электрон-вольтов. Энергия взаимного расположения атомных остатков (см. рис. 12.1) в первом приближении при недостаточно высоких энергиях колебаний имеет параболическую форму и, как известно, также квантуется:

$$E_{\rm kon} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}},\tag{12.2}$$

где v = 0, 1, 2, ... - колеблющееся квантовое число;

ω – частота колебаний.

Количественные расчеты дают расстояние между колеблющимися уровнями энергии молекул на порядок меньше энергии электронной.

Если считать двухатомную молекулу идеально жестким образованием, то кинетическая энергия ее вращательного движения  $E_{o6} = L^2 / 2J_0$ , где L – момент импульса;  $J_0$  – момент инерции молекулы. Исследования указывают на то, что вращение двухатомной молекулы может рассматриваться как вращение одной частицы с моментом инерции  $J_0$  и с массой, равной сводной массе двух атомов. Момент импульса такой частицы квантуется (см. уравнение (10.14)):  $L = \sqrt{J(J+1)}\hbar$ , где J = 0, 1, 2, 3, ... – вращательное квантовое число. Таким образом, энергия вращающегося квантового уровня

$$E_{\rm of} = \frac{J(J+1)}{2J_0}\hbar^2$$
(12.3)

квантуется, а расчет дает расстояние между энергетическими вращательными уровнями еще на порядок меньше колебательных. Энергетические уровни молекулы могут быть представлены схемой, как это выполнено на рис. 12.2. Каждый из электронных энергетических уровней *En* расщепляется на колебательные уровни ( $E_{\text{кол}}$ ), каждый из которых, в свою очередь, расщепляется на вращательные уровни ( $E_{o6}$ ). Поэтому общая структура энергетических уровней валентных электронов представлена в крайнем правом столбце диаграммы на рис. 12.2.



Рис. 12.2

Соответственно оптические спектры излучения и поглощения молекул принципиально отличаются от оптических спектров атомов. Каждая спектральная линия, которая могла бы соответствовать переходам между соответствующими электронными уровнями энергии, расщепляется на большое количество линий, соответствующих переходам между колеблющимися и вращательными энергетическими уровнями, превращая спектральные линии в спектральные полосы, состоящие из большого количества близкорасположенных спектральных линий. *Молекулярные спектры* называются *полосатыми*. Спектральные молекулярные полосы имеют четко выраженные границы, которые могут быть расположены как со стороны длинных волн, так и со стороны коротких. Полосы располагаются с определенной последовательностью, создавая серии полос. Структура энергетических уровней молекул может быть подробно исследована посредством изучения комбинационного рассеяния света молекулярными разреженными газами. Явление состоит в том, что в спектре рассеяния, возникающего при прохождении света через газы, жидкости или прозрачные твердые тела, наряду с несовмещенной спектральной линией  $v_0$  появляются новые линии, частоты которых представляют комбинации частоты падающего света и частот качающихся и вращательных переходов:  $v = v_0 \pm v_i$ . По последнему признаку получено название «комбинационное рассеяние света».

Переходы между вращательными (ротационными) уровнями молекул соответствуют частотам радиодиапазона электромагнитных волн и могут изучаться с помощью *радиоспектроскопических методов*. Переходы между энергетическими уровнями сопровождаются излучениями квантов электромагнитного излучения, требующего законов сохранения, отражаемых в так называемых правилах отбора. Соответствующие переходам с изменением квантовых чисел на  $\pm 1$ . Переход между J + 1-м и J-м орбитальными уровнями соответствует изменению энергии

$$\Delta E = \frac{L_{J+1}^2}{2J_0} - \frac{L_J^2}{2J_0} = \frac{\hbar^2}{2J_0} \left\{ (J+1)(J+2) - (J+1)J \right\} = \frac{\hbar^2}{J_0} (J+1),$$

где *J* – вращательное квантовое число;

*J*<sub>0</sub> – момент инерции молекулы.

Измерив резонансную радиочастоту соответствующего перехода ω, получим возможность определить момент инерции молекулы и предположить ее строение:

$$\hbar\omega = \Delta E = \frac{\hbar^2}{J_0} (J+1) \Longrightarrow J_0 = \frac{\hbar (J+1)}{\omega}, \qquad (12.4)$$

где  $\hbar\omega$  – энергия кванта электромагнитного излучения, соответствующая резонансной частоте поглощения.

## 12.3. Поглощение и излучение энергии молекулами. Вынужденное излучение. Принципы работы квантовых генераторов

В нормальном невозбужденном состоянии валентные электроны могут находиться сколь угодно долго. Учитывая соотношение неопределенностей (7.5), мы видим, что энергия таких состояний определена совершенно точно:  $\Delta E = 0$ . Но если на атом попадает квант энергии, валентные электроны переходят в возбужденное состояние, в котором они находятся промежуток времени порядка  $10^{-8}$  с, после чего произвольно возвращаются в состояние с меньшей энергией. Возбужденные энергетические уровни имеют некоторую конечную энергетическую ширину  $\Delta E > 0$ . Переход между энергетическими уровнями подчиняется законам сохранения энергии, импульса и момента импульса (закон сохранения спина), эти правила проявляют себя в так называемых *правилах отбора*, регламентирующих изменение некоторых квантовых чисел только на ±1.

Переход в возбужденное состояние является вынужденным, он зависит как от особенностей атомной поглощающей системы, так и от особенностей поглощаемого ею излучения. Рассматривая равновесное электромагнитное излучение в адиабатической полости, А. Эйнштейн пришел к выводу, что при наличии только этих двух механизмов – вынужденного поглощения и произвольного излучения – равновесие не может установиться. Должен существовать еще механизм вынужденного излучения, которое бы зависело не только от излучающей системы, но и от особенностей падающего на него излучения. Такое излучение называется вынужденным, оно имеет ряд важных особенностей. Оно является высококогерентным с вызывающим его излучением: по фазе колебаний, по частоте колебаний, по направлению распространения, по направлению поляризации.

Вероятность процессов вынужденных поглощений и излучений, как показал Эйнштейн, совершенно одинакова и количество актов поглощения и излучения зависит только от населенности электронами соответствующих энергетических уровней. Если вещество, состоящее из атомов, находится в равновесном состоянии, то населенность уровней, т. е. число электронов N(E) с энергией E, подчиняется статистике Больцмана:

$$N(E) = Ae^{-\frac{E}{kT}},$$
(12.5)

где *А* – постоянное нормирование;

*k* – постоянная Больцмана.

Из формулы (12.5) следует, что уровни с меньшей энергией населены больше, чем с большей. Если электромагнитное излучение пройдет через такое равновесное вещество, оно уменьшит свою интенсивность *I* по закону Бугера:

$$I = I_0 e^{-kx},$$
 (12.6)

где *х* – толщина слоя вещества;

*k* – его коэффициент поглощения.

Но оказывается, что можно создать такое состояние вещества, как инверсная населенность, в котором уровни с большей энергией населены больше. Такое состояние не равновесно, поэтому понятие температуры для него не используется. Иногда говорят, что это состояние с отрицательной температурой (см. уравнение (12.5)), пользуясь понятием температуры условно.

Инверсная населенность энергетических уровней может быть создана там, где есть так называемые *метастабильные уровни*. Это энергетические уровни, переход с которых запрещен правилами отбора, но этот запрет недостаточно жесткий. Поэтому время жизни таких уровней может быть в миллионы раз длиннее за время жизни нормальных возбужденных уровней, а их населенность становится инверсной, электроны на них задерживаются гораздо дольше. Если через вещество, в котором имеется инверсная населенность энергетических уровней, проходит электромагнитное излучение соответствующей переходу с этих уровней частоты, то, по равной вероятности переходов, число вынужденных излучений преобладает над числом поглощений, и электромагнитное излучение усиливается.

Процесс перевода среды в инверсное состояние называется накачкой усиливающей среды. Суть метода создания такого состояния состоит в том, чтобы посредством специальных молекулярных примесей выборочно разрушить некоторые энергетические уровни, на которые происходит спонтанный переход электронов, и таким образом создать инверсную населенность уровней. Другим методом накачки является использование вспомогательного излучения, создающего избыточную населенность верхних уровней по сравнению с равновесной. Практическое создание инверсной населенности проводится всегда по трехуровневой схеме.

В гелий-неоновом лазере усиливающей средой служит плазма высокочастотного разряда, создаваемая в смеси гелия с неоном. За счет столкновений с электронами атомы гелия переходят в возбужденное состояние с энергией  $E_2$  (рис. 12.3).



Рис. 12.3

Столкновение возбужденных атомов гелия с атомами неона приводят к возбуждению последних и переходу на один из верхних уровней неона  $E'_2$ , расположенных близко к уровню  $E_2$ . Переход с этого уровня на уровень  $E_3$  сопровождается излучением лазера.

Приборы, в которых используется этот эффект, называются квантовыми усилителями, квантовыми генераторами (КГ) или благодаря свойствам вынужденного излучения генераторами когерентного излучения (ГКВ). Если квантовый усилитель работает в оптическом диапазоне, это ОКГ, или лазер (абревиатура из английского названия прибора); молекулярные усилители в радиодиапазоне частот – мазеры.

Лавинообразное нарастание интенсивности света в лазерах значительно усиливается за счет многократного прохождения усиливающегося света через один и тот же слой усиливающей среды. С этой целью усиливающая среда, например,кювета со смесью гелия и неона размещается между двумя зеркалами, которые установлены параллельно друг другу. Зеркала могут быть либо плоскими, либо, что чаще употребляется, вогнутыми (рис. 12.4).



Рис. 12.4

Зеркало 1 сплошное, а 3 полупрозрачное. Произвольный фотон, появившийся в усиливающей среде 2, приводит к появлению процесса генерации света. Но, если фотон двигается перпендикулярно плоскостям зеркал, то поток света, возбужденный им, после взаимодействия с полупрозрачным зеркалом 3 частично возвращается и проходит снова сквозь усиливающую среду. Усиленный и отраженный зеркалом 1 световой поток снова проходит сквозь активную среду и т. д. Такой процесс называется насыщением в оптическом квантовом генераторе и имеет свои особенности, которые будут понятны на языке волновых представлений. С точки зрения волновых представлений усиление света означает непрерывный рост амплитуды световой волны. Но для этого необходимым условием является совпадение фаз отраженных волн с фазой первичной волны при произвольном количестве отражений. Совпадение фаз происходит при условии, что оптический путь света целочисленно кратен длине волны. Такое устройство именуется резонатором. Лучи, исходящие из полупрозрачного зеркала, являются результатом интерференции многих когерентных волн, имеющих разность фаз, кратную 2*π*. Это обеспечивает наибольшую результативную амплитуду и интенсивность света, излучаемого лазером. Интерференция многих когерентных волн приводит к тому, что интерференционный максимум очень узок. На практике возникает много сложностей, дающих распространение спектральных линий, и реальный спектр состоит из достаточно узких, расположенных на расстоянии  $\Delta v = c/2L$ , линий, где  $\Delta v$  – разность частот; c – скорость света в вакууме; L – оптический путь света в лазере.

Одной из важных особенностей излучения лазера является острая направленность лучей, обусловленная механизмом процесса вынужденного излучения и его прохождением в резонаторе. Фотон, летящий под углом к оси резонатора, выйдет из активной среды. В генерации и усилении принимают участие только фотоны, летящие параллельно оси резонатора. Поэтому свет лазера имеет острую направленность.

Благодаря высокой когерентности и острой направленности излучения ОКГ, они могут с большой эффективностью использоваться для связи, локации, получения очень высоких температур в малых объемах и т. д. С помощью ОКГ можно устанавливать связь на больших расстояниях. Излучением лазеров можно резать и пробивать очень мелкие отверстия в тугоплавких материалах, производить сварку микродеталей. ОКГ используются в хирургии. Перспективы использования лазеров еще далеко не исчерпаны.

## **III. ОСНОВЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА**

### Тема 13. ТВЕРДЫЕ ТЕЛА. КЛАССИФИКАЦИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПО ТИПАМ СИЛ СВЯЗИ

Характерной особенностью твердого тела является стабильность его формы в нормальных условиях и малые колебания атомов вокруг некоторых фиксированных положений равновесия. По характеру расположения этих равновесных положений твердые тела делятся на кристаллические и аморфные. Кристаллы характеризуются правильным расположением равновесных положений, называемых узлами кристаллической решетки, и, соответственно, пространственной периодичностью всех свойств кристаллов. Расположение атомов в аморфных телах с термодинамической точки зрения является неравновесным (метастабильным), и со временем аморфное тело должно кристаллизоваться. Однако в обычных условиях время перехода в равновесное состояние настолько велико, что аморфное тело ведет себя практически неограниченно долго как стойкое твердое тело.

Исторически традиционным является использование твердых тел в качестве конструкционных материалов. При этом на первый план выступают их механические свойства, такие как крепкость, пластичность, хрупкость, вес. Использование твердых тел в теле-, радио-, электротехнике и приборостроении обусловлено особенностями их электрических, магнитных и оптических свойств: полупроводниковые приборы и схемы, ферромагнитные пленки, сверхпроводящие элементы современных счетных устройств и др.

Понимание природы свойств твердых тел возможно только на основании их исследования квантовой механикой. В то время как квантовая теория кристаллов разработана очень подробно, квантовая теория аморфных тел находится на стадии становления. В дальнейшем рассматриваются только кристаллические жесткие тела, более того, нас будут интересовать в основном их электрические свойства.

Свойства твердых тел сохранять свою форму объясняются сильной связью между их атомами. Особенностями этих связей объясняются и электрические свойства кристаллов. Соответственно, кристаллы можно классифицировать по типам сил связи как атомные, ионные, металлические и молекулярные.

Атомная, или гомеополярная, связь является наиболее сильной из всех типов связи. Кроме молекул, по этому типу связи образуются также кристаллы. Типичными примерами вещества с атомной связью являются алмаз, кремний, германий. Атомная связь возникает между одинаковыми атомами в результате особого квантово-механического эффекта, называемого обменным эффектом. Обменные силы возникают при взаимодействии между атомами за счет перекрытия их электронных облаков, что приводит к обмену электронами и их обобщению. Важнейшей особенностью обменного взаимодействия есть его резкая зависимость от ориентации спинов электронов, осуществляющих связь между атомами. Сильная связь возникает только при антипараллельных спинах электронов. Второй важнейшей особенностью обменного взаимодействия является то, что он обладает свойством насыщения – связь осуществляется только парой электронов. В силу этого атомная связь именуется парно-электронной связью. Участвовать в обменных связях могут только электроны внешних незаполненных оболочек атомов, поэтому атомную связь называют валентной или ковалентной. При атомной связи вероятность найти электрон вблизи одного из ядер взаимодействующих атомов может либо быть одинаковой, либо разной. Предельным случаем атомной связи является ионная СВЯЗЬ.

Ионная, или гетерополярная, связь. Типичным примером веществ с гетерополярным типом связи являются соединения щелочных металлов с галогенами, например NaCl, NaF, LiF. В результате образования ионов Na<sup>+</sup> и Cl<sup>-</sup> между ними возникает кулоновское притяжение. Вза-имодействие большого числа ионов разного знака приводит к образованию устойчивой конфигурации, в которой, как правило, ионы занимают периодически правильные положения в пространстве, т. е. вещества с ионной связью обычно образуют кристаллы.

Металлическая связь. Одной из разновидностей атомной связи является металлическая связь. Конечно считается, что внешние валентные электроны атомов металлов коллективизируются, принадлежат одновременно всем решеткам. Эта коллективизация относится и к электронам внутренних оболочек, однако их «воля» значительно ограничена.

Молекулярная связь. Твердые тела с молекулярной связью характеризуются жесткостью и низкой температурой плавления. Типичными примерами молекулярных твердых тел являются органические вещества. Отдельные атомы в них образуют комплексы, связанные между собой слабыми силами группы, такого же типа, как и в жидкостях.

### Тема 14. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ ПО КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

14.1. Понятие о квантовой статистике. Распределение состояний и функции заполнения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака.

14.2. Понятие о вырождении квантовых систем. Вырожденный бозе-газ и формула Планка.

# 14.1. Понятие о квантовой статистике. Распределение состояний и функции заполнения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака

Твердые тела представляют собой системы с большим количеством структурных элементов (атомов, молекул, электронов), которые могут рассматриваться как термодинамические системы. Термодинамические системы могут изучать термодинамические и статистические методы. Термодинамический метод не интересуется природой структурных элементов и поэтому не подвергается принципиальным изменениям при его использовании для исследования поведения термодинамических систем из квантовых частиц. Статистический метод принципиально базируется на конкретных представлениях о природе и закономерностях движения отдельных структурных элементов системы. Поэтому *квантовых* объектов, имеет свои особенности по сравнению с классической статистической теорией.

Общий подход статистической теории исходит из того, что все динамические характеристики движения составных частиц объявляются случайными величинами, физическое содержание которых имеют только среднестатистические значения. Определение среднестатистических значений динамических характеристик происходит посредством статистических распределений частиц по данным характеристикам. В основе всех распределений лежит распределение по координатам и импульсам, являющимся основными параметрами механического состояния частиц. От распределения по координатам и импульсам переходят к распределению по энергиям.

**Функция распределения** строится на основании конкретных представлений о природе составных частиц системы и об особенностях их движения. Из-за наличия волновых свойств и принципа нераспознания тождественных квантовых частиц и связанного с ними соотношения неопределенностей, квантованности энергии и различной заполняемости состояний частиц с целочисленными и полуцелыми спинами, необходимо установить отдельно: как распределены квантовые уровни энергии, какова *плотность* энергетических уровней g(E) и какова вероятность заполнения частицами каждого из уровней f(E). В таком случае число частиц, имеющих энергию в интервале (E, E + dE),

$$dN(E) = f(E)g(E)dE.$$
 (14.1)

Формально состояние термодинамической системы из N частиц может быть изображено точкой в так называемом фазовом 6N-мерном  $\Gamma$ -пространстве координат и импульсов. Благодаря соотношениям неопределенностей состояние частиц, попавших в элементарный фазовый объем  $\Delta\Gamma_0 = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = h^3$ , воспринимается как одно состояние. Плотность состояний в элементарном фазовом объеме обозначается  $\Delta\Gamma$ , что соответствует энергиям из интервала ( $E, E + \Delta E$ ):

$$g(E) = \frac{\Delta\Gamma}{h^3}.$$
 (14.2)

Для выявления наиболее общих особенностей квантовой статистики вводится идеальный квантовый газ, в котором все точки реального пространства равноправны, поэтому 6*N*-мерное Г-пространство переходит в 6-мерное µ-пространство координат и импульсов. Объем координат совпадает с физическим объемом газа: состояние всей системы изучается в 3-мерном пространстве импульсов, в единичном объеме координат выделяется элементарный объем импульсов.

$$\Delta \mu = \Delta p_x \Delta p_x \Delta p_x = \frac{h^3}{V}.$$
 (14.3)

Из-за хаотичности движения частиц все направления импульсов равновероятны и в сферическом слое пространства импульсов объемом  $4\pi p^2 dp$  (рис. 14.1) содержится число состояний

$$dN_{g}(p) = g(p)dp = \frac{4\pi p^{2}dp}{h^{3}}V,$$
(14.4)

но число состояний с данным импульсом равно числу состояний с энергиями, обусловленными этими импульсами:

$$dN_{g}(p) = dN_{g}(E) = dN_{g}(\lambda) \Rightarrow g(E)dE = g(\lambda)d\lambda =$$
  
=  $g(p)dp \Rightarrow g(E) = \frac{dN(p)}{dE} = \frac{4\pi p^{2}}{h^{3}}V\frac{dp}{dE}.$  (14.5)



Рис. 14.1

Учитывая связь энергии и импульса  $E = \frac{p^2}{2m}$  и  $p = \sqrt{2mE}$ , имеем

$$\frac{dp}{dE} = \frac{m}{p} = \sqrt{\frac{m}{2E}}.$$
(14.6)

После подстановки в равенство (14.5) получим выражение для распределения плотности состояний по энергиям:

$$g(E) = \frac{4\pi m^{\frac{3}{2}2}V}{h^3} \sqrt{E},$$
 (14.7)

т. е. плотность состояний растет с ростом энергии пропорционально  $\sqrt{E}$ , как это показано на рис. 14.2.

Вероятность заполнения состояний частицами f(E), или просто функция распределения, определяет среднее число частиц в данном состоянии.

Система частиц с целочисленными или нулевыми спином (фотоны, фононы, некоторые ядра атомов) подчиняется квантовой статистике, разработанной независимо индийским ученым Ш. Бозе и А. Эйнштейном, которая носит название *статистики Бозе – Эйнштейна*, подчиняющиеся ей частицы – *бозонами*. Для бозонов функция распределения

$$f_{\rm b}(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu)}{kT}} - 1},$$
(14.8)

где *k* – постоянная Больцмана;

*Т* – абсолютная температура системы;

$$\mu = \frac{U - TS + pV}{N}$$
 – химический потенциал, отнесенный к одной ча-

стице;

*U* – внутренняя энергия системы;

S – ее энтропия;

*p* – давление;

V-объем.

Химический потенциал определяется работой, которую нужно выполнить в изобарно-изотермическом процессе при увеличении числа частиц на единицу.



Рис. 14.2

**Функцию распределения для частиц с полуцелым спином** разработали независимо друг от друга итальянский ученый Энрико Ферми и английский ученый французского происхождения Поль Дирак. Квантовая статистика для таких частиц называется **статистикой Ферми** – **Дирака**, а частицы с полуцелым спином (электроны, протоны, нейтроны и др.) называются фермионами.

Для фермионов функция распределения:

$$f_{\Phi}(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-E_{e})}{kT}} + 1},$$
(14.9)

где *E<sub>F</sub>* – представляет энергию (или уровень) Ферми.

#### 14.2. Понятие о вырождении квантовых систем. Вырожденный бозе-газ и формула Планка

Термодинамическая система как частный случай – идеальный газ, поведение которой не подчиняется закономерностям классической статистики Максвелла – Больцмана, а подчиняется статистикам Бозе – Эйнштейна или Ферми – Дирака, называется вырожденной. Эффект вырождения системы связан с квантовыми свойствами частиц системы. Поэтому параметры вырождения можно оценить, исходя из соотношения неопределенностей. Если параметр неопределенности координаты *a*, например, это размеры кристаллической решетки, а неопределенность импульса порядка самого импульса частицы, то  $ap \ge h$ , где использована постоянная Планка *h*, как это принято в фи-

зике твердого тела. Объем неопределенности  $a^3 = \frac{V}{N} = \frac{1}{n_0} \ge \left(\frac{h}{p}\right)^3$ , где V – объем системы; N – общее количество частиц;  $n_0$  – концентрация частиц. Энергия частиц  $E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow p = \sqrt{2mE}$ , тогда  $\frac{h^3 n_0}{(2mE)^{3/2}} \le 1$ . Счи-

тая E = kT и исходя из предельной ситуации, имеем для температуры вырождения  $T_{\rm B}$ :

$$T_{\rm B} = \frac{h^2 n_0^{\frac{2}{3}}}{2mk}.$$
 (14.10)

Оцениваемая выражением (14.10) температура вырождения отличается от полученной более строго только целочисленным множителем:

$$T_{\rm B} = \frac{h^2 n_0^{2/3}}{2\pi mk}.$$
 (14.11)

Температурный критерий вырождения:  $T \le T_{\rm B}$  – система частиц вырожденная;  $T \ge T_{\rm B}$  – система частиц невырожденная, и ее поведение подчиняется классическим закономерностям.

Строгая оценка критериев вырождения системы исходит из условия, что  $exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right) >> 1$  и единицей в знаменателях соотношений (14.8) и (14.9) можно пренебрегать, поэтому они переходят в известное соотношение для распределения Больцмана:  $f(E) = \frac{dN(E)}{NdE} = e^{\frac{\mu}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} = Ae^{-\frac{E}{kT}}$ .

Функция распределения как среднее число частиц в данном состоянии в классической и квантовых статистиках может быть представлена единым соотношением:

$$f_{\rm b}(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu)}{kT}} - \delta}.$$
 (14.12)

Для распределения Максвелла – Больцмана  $\delta = 0$ ,  $\mu = 0$ ; для распределения Бозе – Эйнштейна  $\delta = -1$ ; для распределения Ферми – Дирака  $\delta = +40$ .

В качестве примера использования возможностей квантовой статистики рассмотрим вывод формулы Планка для теплового излучения.

Равновесное тепловое излучение в полости объемом V, при постоянной температуре T, можно рассматривать как идеальный бозе-газ фотонов (спин фотона  $\hbar$ ). Количество фотонов из интервала длин волн ( $\lambda + d\lambda$ ) в объеме излучения V ввиду двух возможных направлений поляризации фотонов  $dN(\lambda) = 2g(\lambda)f(\lambda)d\lambda$ , где  $g(\lambda) = g(p)\frac{dp}{d\lambda}$ ;  $g(p) = \frac{4\pi p^2}{h^3}V$  (см. соотношение (14.5)) – плотность квантовых состояний фотонов исследуемого интервала длин волн;  $p = \frac{h}{\lambda}$  – импульс фотона;  $\frac{dp}{d\lambda} = -\frac{h}{\lambda^2}$ ;  $f(\lambda) = \frac{1}{exp(\frac{hc}{\lambda kT} - 1)}$  – функция

заполнения состояний фотонами. Тогда  $dN(\lambda) = \frac{8\pi V}{\lambda^4} \frac{d\lambda}{exp\left(\frac{hc}{\lambda kT} - 1\right)}.$ 

Энергия каждого из фотонов исследуемого интервала  $\varepsilon = \frac{hc}{\lambda}$ , поэтому спектральная плотность объемной плотности энергии фотонов равновесного излучения в полости черного тела:

$$\rho^*(\lambda,T) = \frac{dE(\lambda)}{Vd\lambda} = \frac{dN(\lambda)hc}{\lambda Vd\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{exp\left(\frac{hc}{\lambda kT} - 1\right)}.$$
 (14.13)

Полученная величина связана со спектральной густотой энергетической светимости соотношением:  $r(\lambda, T) = \frac{c}{4}r(\lambda, T)$ , поэтому

$$r^{*}(\lambda,T) = \frac{c}{4}\rho^{*}(\lambda,T) = \frac{2\pi hc^{2}}{\lambda^{5}} \frac{1}{exp\left(\frac{hc}{\lambda kT} - 1\right)},$$
(14.14)

что в точности совпадает с формулой Планка.

#### Тема 15. ТЕПЛОЕМКОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

15.1. Проблемы классической теории теплоемкости твердых тел. Закон Дюлонга – Пти. Теория теплоемкости кристаллов Эйнштейна.

15.2. Теория теплоемкости кристаллов по Дебаю.

### 15.1. Проблемы классической теории теплоемкости твердых тел. Закон Дюлонга – Пти. Теория теплоемкости кристаллов Эйнштейна

Классическая теория теплоемкости базируется на принципе Больцмана (теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы). Если применить этот принцип к твердому телу, имеющему 6 степеней свободы, то молярная теплоемкость твердого тела  $C_M^{(V)} = 3R$ , где R – универсальная газовая постоянная. Такой вывод полностью соответствует опытно установленному закону Дюлонга – Пти, утверждающему, что молярная теплоемкость всех химически простых кристаллических твердых тел одинакова и равна

$$C_M = 3R. \tag{15.1}$$

Но этот закон, как указывает опыт, справедлив только для не очень низких температур. В пределах низких температур наблюдается резкое различие экспериментальных результатов по закону Дюлонга – Пти (рис. 15.1), и в области низких температур имеет место так называемый закон кубов Дебая:

$$C_M = BT^3, \tag{15.2}$$

где В – некоторая константа.

Область переходных температур от умеренных к низким имеет достаточно сложную температурную зависимость молярной теплоемкости.



Рис. 15.1

Более того, в металлических кристаллах электроны проводимости, по классическим представлениям, рассматриваются как идеальный одноатомный газ, находящийся в состоянии теплового равновесия с кристаллической решеткой. Согласно принципу Больцмана, электронный газ должен иметь молярную теплоемкость  $C_M^{(ei)} = \frac{3}{2}R$  и, таким образом, теплоемкость металлических кристаллов должна быть  $C_M^{(v)} = \frac{9}{2}R = 4,5R$ , т. е. в 1,5 раза больше теплоемкости диэлектрических кристаллов даже в пределах высоких температур. Но опыт учит, как видно из рис. 15.1, что теплоемкость электронного газа практически не обнаруживается – закон Дюлонга – Пти имеет место и для диэлектриков, и для металлов. Это значит, что классическая теория не в состоянии объяснить особенности теплоемкости ни кристаллов, ни электронов проводимости в металлах. Причина заключается в неправомерности использования закона о равномерном распределении энергии по степеням свободы в пределах низких температур, где среднюю энергию колебания частиц необходимо вычислять по законам квантовой механики.

Первая теория теплоемкости кристаллов, исходящая из квантовых свойств тепловых колебаний в кристаллах, построена А. Эйнштейном. Кристалл из N атомов в этой теории рассматривается как система квантовых осцилляторов, каждый из которых настроен на одну и ту же частоту. Средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы осциллятора, исчисляется по законам статистики и равна:

$$\left\langle \varepsilon \right\rangle = \frac{h\nu}{2} + \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1},\tag{15.3}$$

что с точностью до аддитивной константы совпадает с выражением среднего значения энергии осциллятора по формуле Планка. Внутренняя энергия моля кристалла, состоящая из трехмерных осцилляторов, равна:

$$U = 3N_A \langle \varepsilon \rangle = 3N_A \frac{h\nu}{2} + 3N_A \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1},$$
(15.4)

откуда молярная теплоемкость кристалла:

$$C_{M} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V} = 3R \left(\frac{hv}{kT}\right)^{2} \frac{e^{\frac{hv}{kT}}}{\left(e^{\frac{hv}{kT}} - 1\right)^{2}}.$$
 (15.5)

Из условия  $\frac{h\nu}{kT_E} = 1$  вводится характеристическая температура (температура Эйнштейна):

$$T_E = \frac{h\nu}{k} = \frac{\hbar\omega}{k},$$
(15.6)

где  $\omega = 2\pi v$  – частота, на которую настроены осцилляторы.

Формула (15.5) принимает вид:

$$C_{M} = 3R \left(\frac{T_{E}}{T}\right)^{2} \frac{e^{\frac{T_{E}}{T}}}{\left(e^{\frac{T_{E}}{T}} - 1\right)^{2}}.$$
(15.7)

При высоких температурах  $h\nu < kT$  и  $e^{\frac{h\nu}{kT}} \approx 1$ ,  $e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx 1 + \frac{h\nu}{kT} - 1 = \frac{h\nu}{kT}$ ,

поэтому  $C_M = 3R$ , что полностью соответствует закону Дюлонга – Пти (уравнение (15.1)).

При низких температурах  $h\nu >> kT$  и  $e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx e^{\frac{h\nu}{kT}}$ . Поэтому

$$C_{M} = 3R \left(\frac{T_{E}}{T}\right)^{2} e^{-\frac{T_{E}}{T}},$$
(15.8)

что только качественно указывает на уменьшение теплоемкости твердых тел с понижением температуры в области низких температур, но количественно отличается от закона Дебая (15.2).

#### 15.2. Теория теплоемкости кристаллов по Дебаю

Современной теорией теплоемкости кристаллов является теория Дебая. Считается, что в кристалле могут возникать колебания разделяемого широкого диапазона по методам генерирования на оптический и звуковой. Теория Дебая исходит из того, что теплоемкость кристаллов обусловлена колебаниями только звукового диапазона. При этом в кристалле могут возникать колебания только таких частот, для которых возможно распространение ответных волн в кристалле. При первом приближении считаем, что в кристаллах распространяются продольные и поперечные волны двух разных поляризаций с одинаковой скоростью U – всего три волновых процесса данной частоты  $\omega$ . Тем

линейным размером L и параметром ячейки  $a \approx \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}}$ , где V – объем

кристалла, а N – общее количество атомов в нем. Учет статистического распределения по расстояниям между узлами кристаллической решетки дает для среднего значения параметра ячейки результат:

$$a \approx \left(\frac{\pi^2 V}{3N}\right)^{\frac{1}{3}}$$

В таком кристалле могут возникать волны, распространяющиеся со скоростью U, с длинами  $2a \le \lambda \le 2L$ . Соответствующие колебания ограничиваются частотами:

сверху частотой

$$\omega_{\max} = \frac{2\pi U}{2a} = U\left(\frac{3\pi N}{V}\right)$$

и снизу частотой

$$\omega_{\min} = \frac{2\pi U}{2L} \to 0, \qquad (15.9)$$

ввиду того, что линейные размеры кристалла по сравнению с размерами ячейки можно считать бесконечно большими:  $L \rightarrow \infty$ .

Для вычисления молярной теплоемкости кристалла  $C_M^V = \left(\frac{\partial Q}{v \partial T}\right)_V = \frac{\partial U}{v \partial T}$ достаточно определить энергию колебаний одно-

го моля узлов кристалла – при постоянном объеме количество подведенной к термодинамической системе теплоты равно увеличению ее внутренней энергии:  $Q = \Delta U$ . С этой целью можно воспользоваться выводами статистической теории, рассматривая кристалл в виде куба, в котором существуют волны и колебания частотного диапазона  $(0 \le \omega \le \omega_{max})$ .

По аналогии с теорией теплового излучения считается, что звуковые волны имеют квантовую природу и представляют собой поток частиц, квантов звуковых волн под названием «фононов». Фононы имеют энергию  $\varepsilon = \hbar \omega$  и квазиимпульс  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ;  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ;  $p = \frac{\hbar \omega}{U}$ . В отличие от фотонов, фононы являются квазичастицами потому, что могут передавать свой импульс узлам кристаллической решетки по частям. Момент импульса (спин) фононов равен нулю, поэтому фононы являются бозонами и подчиняются закону распределения (14.8). Количество фононов не фиксировано, поэтому их химический потенциал  $\mu = 0$ .

Энергия dN фононов частотного диапазона ( $\omega + d\omega$ )

$$dU = dN\hbar\omega = g(\omega)f(\omega)\hbar\omega d\omega; dN = g(\omega)f(\omega)d\omega, \quad (15.10)$$

где густота уровней с частотами указанного диапазона (см. соотношение (14.5))  $g(\omega) = g(p) \frac{dp}{d\omega} = \frac{\omega^2 V}{\pi U^3}$ . Ввиду того, что в кристалле могут распространяться продольные и поперечные двух направлений поляризации волны, имеем:

$$g(\omega) = 3\frac{\omega^2 V}{\pi U^3}.$$
 (15.11)

Таким образом  $dU = 3 \frac{\omega^2 V}{\pi U^3} \frac{\hbar \omega d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}$ , а полная энергия  $U = \int_{0}^{\omega_{max}} 3 \frac{V}{\pi U^3} \frac{\hbar \omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} d\omega.$  (15.12)

Интеграл (15.12) имеет сложную форму и может быть вычислен в конечных аналитических выражениях для предельных случаев высоких и низких температур. Для этого вводится характеристическая тем-<u>h</u>

пература Дебая из соотношения  $\frac{\hbar\omega}{kT_D} = 1 \Rightarrow T_D = \frac{\hbar\omega}{k}$ .

Для высоких температур  $T >> T_D \frac{\hbar \omega}{kT} << 1 \Rightarrow e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1 \approx \frac{\hbar \omega}{kT}.$ 

Поэтому 
$$U = 3 \frac{\hbar V}{\pi U^3} \int_0^{\omega_{\text{max}}} \frac{\omega^3 d\omega}{\hbar \omega} kT = 3 \frac{V}{\pi U^3} \frac{\omega_{\text{max}}}{3}$$
, или после подстанов-

ки значения  $\omega_{max}$  из соотношения (15.9) имеем для энергии одного моля:

$$U_{M} = \frac{V}{\pi U^{3}} \frac{3\pi N_{A} kT}{V} = 3k N_{A} T = 3RT, \qquad (15.13)$$

что для теплоемкости при высоких температурах приводит к закону Дюлонга – Пти (15.1):

$$C_M^{(V)} = \frac{\partial U_M}{\partial T} = 3R. \tag{15.14}$$

В пределах низких температур, где  $T \ll T_D$ , имеем  $\frac{\hbar\omega}{kT} >> 1 \Rightarrow e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \approx e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}$  и  $\omega_{\text{max}}$  можно считать бесконечно большой:  $\omega_{\text{max}} \rightarrow \infty$ . Поэтому  $U = 3 \frac{\hbar V}{\pi U^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}} kT$ . Для вычисления данного инте-

грала произведем замену переменных:  $\frac{\hbar\omega}{kT} = x \Longrightarrow \omega = \frac{kT}{\hbar}x; d\omega = \frac{kT}{\hbar}dx.$ 

Соответственно

$$U = 3\frac{\hbar V}{\pi U^3} \frac{k^4}{\hbar^4} T^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^3 k^4 V}{5U^3 \hbar^3} T^4, \text{ где} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}.$$

Таким образом,

$$C_{M}^{(V)} = \frac{\partial U_{M}}{\partial T} = \frac{4\pi^{3}k^{4}V_{M}}{5U^{3}\hbar^{3}}T^{3} = BT^{3},$$
(15.15)

что полностью согласуется с законом кубов Дебая (15.2).

### Тема 16. ЭЛЕМЕНТЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

16.1. Общие понятия об энергетических зонах в кристаллах и основные выводы зонной теории.

16.2. Динамика движения электронов в кристаллах и особенности функции распределения Ферми – Дирака.

16.3. Классификация твердых тел по электропроводности.

#### 16.1. Общие понятия об энергетических зонах в кристаллах и основные выводы зонной теории

Общие понятия о зонной структуре. Зонная структура кристаллов (твердых тел) является основой большинства современных представлений о механизмах различных явлений в диэлектриках, полупроводниках и проводниках (металлах). В общем, эти представления сводятся к тому, что электрон в твердом теле имеет разрешенные значения энергии в определенных интервалах ( $E_{i \max}$ ,  $E_{i \min}$ ) разделенных значений энергии и не может иметь в кристалле запрещенных значений энергии. Интервалы разрешенных значений носят название разрешенных зон, интервалы энергий, не осуществляемых в кристаллах, носят название запрещенных зон. Число возможных состояний в разрешенных зонах конечно, что в силу принципа запрета Паули приводит к конечному числу электронов, обладающих энергией в данной зоне. Переход электрона из зоны в зону связан с изменением энергии не менее ширины запрещенной зоны. Такой переход может производиться за счет энергии тепловых колебаний решетки, освещения, электрических полей.

Зонную структуру кристаллов подтверждает и опыт. Например, спектры поглощения твердых тел в оптическом участке и в области мягких рентгеновских лучей состоят из отдельных широких полос. Это говорит о том, что электроны твердого тела могут поглощать только такую энергию, что не меньше ширины запрещенной зоны:  $hv = E_{n+1 \min} - E_{n \max}$ , и не больше расстояния между дном одной зоны и потолком другой более высокой зоны.

Теоретически зонная структура кристаллов исходит из решения уравнения Шрёдингера для кристалла. Однако это уравнение должно содержать 3(Z + 1)N координат частиц, где Z – число электронов в атоме, а N – общее число атомов в кристалле. Уравнение, содержащее столь большое количество переменных, не может быть разрешено точно и решается приближенными методами сведения к изучению движения одного электрона в так называемом самосогласованном поле путем ряда более или менее естественных предположений. Замена реального кулоновского поля некоторым самосогласованным полем является наиболее слабым пунктом теории, потому что это поле не может быть вычислено теоретически. Однако в настоящее время это единственно возможный путь для решения задачи исследования кристалла. При этом волновая функция и величина энергии произвольного электрона находится по решению уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r), \qquad (16.1)$$

где V(r) – самосогласованное поле кристалла вместе с другими электронами.

Самым общим предположением об особенностях этого поля является предположение о его периодичности с периодом решетки кристалла.

В результате решения уравнения (16.1) получены выводы, на основе которых построена теория, известная как зонная теория твердых тел.

#### Основные выводы зонной теории кристаллов.

1. Спектр энергий электрона в кристалле состоит из последовательности зон разрешенных значений энергии, разделенных зонами запрещенных для электронов значений энергии в кристалле.

2. Ширина зоны определяется участком перекрытия электронных облаков двух соседних атомов и не зависит от размеров кристалла (числа атомов в нем). На рис. 16.1 изображено образование зон при сближении атомов натрия,  $r_0$  соответствует постоянной решетке натрия.

3. Для кристалла концевых размеров, содержащего N атомов, зона состоит из N подуровней. Расстояние между подуровнями обратно пропорционально числу атомов в кристалле. При общей ширине зоны

порядка 1 эВ и числе атомов кристалла  $10^{29}$  м<sup>-3</sup> расстояния между подуровнями порядка  $10^{-29}$  эВ.

4. С ростом энергии ширина разрешенных зон увеличивается, а ширина запрещенных зон уменьшается (рис. 16.2). Это связано с тем, что с ростом главного квантового числа растет энергия электрона и увеличиваются размеры электронных облаков, а вместе с тем увеличивается степень их перекрытия и величина обменных сил. Уменьшение ширины запрещенных зон также связано с уменьшением расстояний между атомными уровнями энергий.



5. Изменение расстояний между атомами приводит к изменению ширины зон.

6. Для понимания большинства электрических и оптических свойств полупроводников достаточно рассмотреть верхнюю заполненную (валентную), первую свободную зоны и интервал между ними (запретную зону).

Состояния электронов в зонах должны подчиняться принципу Паули. При этом в состоянии nl, где n – главное, а l – орбитальное квантовые числа, до образования кристалла находились 2N(2l + 1) электронов (N – число атомов образующих кристалл). Но в кристалле, как в атомной структуре, подчиняющейся принципу Паули, таких состояний должно быть в N раз больше. По этой причине состояния электронов в кристалле не могут характеризоваться четверкой квантовых чисел n, l, *ml*, *ms* в свободном атоме и используются, например, три проекции волнового вектора (квазиимпульса)  $\vec{k}(k_x,k_y,k_z)$  и  $m_s$  – магнитное спиновое число. В таком случае *принцип Паули* утверждает: в состоянии (*kx*, *ky*, *kz*, *ms*) может быть не более одного электрона и на любом энергетическом уровне зоны в кристалле может находиться не более двух электронов (с антипараллельными спинами).

Например, в атоме лития электроны находятся в состояниях  $1s_22s_1$  и образовавшиеся зоны в кристалле лития соответственно содержат по 2N уровней (l = 0). При этом внутренняя зона заполнена целиком, а валентная зона заполнена только наполовину.

## 16.2. Динамика движения электронов в кристаллах и особенности функции распределения Ферми – Дирака

Электрические характеристики кристаллов определяются особенностью взаимодействия электронов кристалла с внешними электрическими полями и с внутренними полями кристалла. Принято внутренние поля кристаллов учитывать в характере движения электрона и рассматривать его как свободную квазичастицу – электрон, но с массой, зависящей от его положения внутри зоны, так называемой эффективной массой. К пониманию такого подхода можно подойти по следующим соображениям.

Электрон в кристалле представляется группой волн де Бройля (не смешивать со звуковыми волнами, о которых говорилось выше) частотного диапазона ( $\omega, \omega \pm \Delta \omega$ ) с волновыми числами ( $k, k \pm \Delta k$ ) и энергией  $E = \hbar \omega$ . Скорость его перемещения является групповой скоростью:

$$U = U_{\rm rp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}.$$
 (16.2)

Изменение энергии электрона осуществляется за счет силы внешнего электрического поля  $\vec{F} = e\vec{E}$ , придающей движущемуся со скоростью *U* электрону ускорение:

$$a = \frac{dU}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \frac{dE}{dt}.$$
 (16.3)

Учитывая, что мощность  $N = \frac{dE}{dt} = FU$ , т. е. что это мощность, развиваемая внешними силами, перепишем равенство (16.3):

$$a = F \frac{1}{\hbar} \frac{dU}{dk} = F \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}.$$
 (16.4)

Равенство (16.4) формально можно воспринимать как запись второго закона Ньютона для движения электрона в кристалле под действием внешнего электрического поля, если обозначить

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{1}{m^*} \quad \text{M} \quad m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}$$
(16.5)

считать эффективной массой электрона как свободной квазичастицы с переменной массой, движущейся во внешних полях. Величина и знак эффективной массы зависят от вида функциональной зависимости E = E(k). Ход зависимости E = E(k) для электрона в разрешенной зоне определяется решением уравнения Шрёдингера (16.1) и ее типичная форма приведена на рис. 16.3.



Рис. 16.3

Вблизи дна зоны электрон ведет себя как обычная частица  $\frac{d^2 E}{dk^2} > 0$ :

(минимум функции) и его эффективная масса зависит от ширины зоны, т. е. от степени перекрытия электронных облаков: чем меньше перекрытие, чем слабее связь между атомами, тем труднее с помощью внешнего электрического поля ускорять электроны, тем они более «весомые»  $\frac{d^2E}{dk^2} > 0$ . В потолке зоны  $\frac{d^2 E}{dk^2} < 0$  (см. рис. 16.3) и электрон ведет себя ано-

мально – он двигается против сил поля, ведет себя как положительно заряженная частица («дырка»).

Распределение электронов по энергетическим уровням в зонах подчиняется квантовой статистике Ферми – Дирака (см. п. 14).

В основе статистики Ферми – Дирака для электронов лежат следующие основные положения.

1. Все электроны системы одинаковы, неузнаваемы.

2. Состояния электронов определяются четверкой квантовых чисел (см. выше п. 16.1), а изменение хотя бы одного из них ведет к изменению состояния.

3. В системе не может быть одновременно более одного электрона в данном квантовом состоянии.

Из-за этих особенностей и дискретности энергетических уровней для определения характера распределения электронов в зоне необходимо установить, как распределены квантовые уровни энергии в зоне – плотность энергетических уровней g(E) – и какова вероятность заполнения электронами каждого из уровней f(E). В таком случае число электронов, обладающих энергиями в интервале (E, E + dE),

$$dN(E) = f(E)g(E)dE.$$
 (16.6)

Плотность состояний, т. е. число состояний в единице объема, приходящихся на единичный интервал энергии, определяется соотношением (см. п. 14.1):

$$g(E) = \frac{4\pi m^{\frac{3}{2}}V}{h^3}\sqrt{E},$$
 (16.7)

т. е. плотность состояний растет с ростом энергии пропорционально  $\sqrt{E}$ , как это показано на рис. 16.4.

Вероятность заполнения состояний электронами f(E) определяет среднее число электронов в данном состоянии, оно было получено Ферми после учета волновых свойств электронов (см. п. 14.1):

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1}.$$
(16.8)

В выражении (16.8) *E<sub>F</sub>* представляет энергию (или уровень) Ферми. Энергия Ферми определяется в основном концентрацией электронов и немного зависит от температуры.



Рис. 16.4

Особенности функции Ферми (16.8) при нуле абсолютной температуры и при отличных температурах от нуля представлены на рис. 16.5.



Рис. 16.5

Свойства распределения Ферми:

1) T = 0 К. При температуре 0 К если  $E < E_F$ , то f = 1, и если  $E > E_F - f = 0$ , т. е. все состояния с  $E < E_F$  заняты электронами, а все состояния с  $E > E_F$  свободны. Таким образом, энергия Ферми численно равна максимальной энергии, которую могут иметь электроны при 0 К;

2) T > 0 К. Для  $E \ll E_F f$  близка к единице и f близка к нулю для  $E \gg E_F$ . Для  $E = E_F функция Ферми <math>f = 1/2$ ;
3) T > 0 К и  $E >> E_F$ . Потому что в этих условиях  $e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} >> 1$ , то

$$f(E) \approx e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} = e^{\frac{E_F}{kT}} e^{\frac{E}{kT}} = Ae^{\frac{E}{kT}},$$
 (16.9)

что совпадает с классическим распределением Больцмана для частиц в равновесной термодинамической системе. По принятой терминологии частицы, подчиняющиеся статистике Ферми, называются **фермиона***ми*, газ таких частиц называется **вырожденным**. Следовательно, при условиях, рассмотренных в п. 3, вырождение снимается: газ становится не квантовым, а классическим. Здесь можно отметить, что газ электронов и дырок в полупроводниках при комнатных температурах, где концентрации этих носителей невысоки, является классическим газом, т. е. подчиняется распределению Больцмана.

С учетом выражений (16.7) и (16.8) распределение электронов (16.6) принимает форму, график которой представлен на рис. 16.6, где графики представлены для температур  $0 < T_1 < T_2$ . Обратите внимание на то, что для малых значений энергии разрешенные уровни заполнены полностью, а начиная с некоторых значений энергий уровни заполнены только наполовину и для высоких энергий они свободны, как это следует из графика рис. 16.6.



Рис. 16.6

#### 16.3. Классификация твердых тел по электропроводности

По своим электрическим свойствам твердые тела делятся на проводники (металлы), полупроводники и диэлектрики (изоляторы).

К проводникам относится класс веществ, имеющих в своем составе электрические заряды, расположенные на микроносителях (электроны, ионы), которые могут перемещаться даже под действием слабых электрических полей. С точки зрения зонной теории к проводникам (металлам) относятся вещества, имеющие либо не полностью заполненную энергетическую зону, либо полностью заполненную и свободную, частично перекрывающиеся зоны, что в конечном счете приводит к не полностью заполненной зоне (рис. 16.7, *a*). В таком случае при наложении внешнего электрического поля электроны могут переходить на более высокие энергетические уровни в зоне, вследствие чего получают скорость направленного движения, участвуя в электрическом токе.

К *диэлектрикам* (изоляторам) относятся вещества, не производящие электрический ток. С точки зрения зонной теории это вещества, в которых заполнены все состояния энергетических зон вплоть до валентной зоны, а первая свободная зона находится на расстоянии не менее 2–3 эВ (рис. 16.7, *в*).



Рис. 16.7

К полупроводникам относятся вещества, по свойствам проводимости занимающие промежуточное положение между проводниками и диэлектриками. Кроме того, их электропроводность увеличивается с увеличением освещенности под влиянием электрических полей и механических напряжений; особенно резко их электропроводность зависит от примесей.

С точки зрения зонной теории полупроводниками являются вещества, имеющие полностью заполненные зоны, в том числе и валентную зону, а ближайшая незаполненная зона – зона проводимости – отстоит на расстоянии не более 2–3 эВ (рис. 16.7, б). В этом случае при 0 К все энергетические уровни заняты, а переходы между уровнями запрещены принципом Паули, такие переходы не сопровождаются изменением макросостояния кристалла и не могут участвовать в обмене энергией с внешним электрическим полем, т. е. не могут двигаться под действием внешнего электрического поля. Для того чтобы электроны полупроводника могли принимать энергию внешнего электрического поля и создавать тем самым электрический ток, необходимо часть электронов перевести через запретную зону в зону проводимости. Тем самым в валентной зоне появятся свободные места на разрешенных энергетических уровнях - «дырки» и электроны в зоне проводимости, имеющие возможность принимать энергию внешнего электрического поля. Место «дырок» также может заниматься электронами более глубоких энергетических уровней и, таким образом, под действием внешнего электрического поля может осуществляться направленное движение электронов и в зоне проводи мости, и в валентной зоне – создается электрический ток. Для опрокидывания электронов в зону проводимости потребуется энергия тех воздействий, о которых было сказано выше.

Распределение веществ на полупроводники и изоляторы условно. Хорошим изолятором является алмаз с шириной запрещенной зоны 5,6 эВ, а хороший полупроводник германий имеет ширину запрещенной зоны менее 1 эВ.

# Тема 17. ПОЛУПРОВОДНИКИ И ИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

- 17.1. Электрические свойства полупроводников.
- 17.2. Электрическая проводимость собственных полупроводников.
- 17.3. Электрическая проводимость примесных полупроводников.
- 17.4. Контактные явления в полупроводниках. Свойства *p-n*-перехода.

# 17.1. Электрические свойства полупроводников

Важнейшим свойством полупроводников является зависимость их электрических свойств от таких внешних факторов, как температура, освещенность, давление, электрические и магнитные поля. Формальным, но не решающим признаком принадлежности вещества к полупроводникам является величина электропроводности, что для них может принимать значения в пределах  $\sigma = 10^6 - 10^8 \text{ Om}^{-1} \text{ m}^{-1}$ . Для металлов  $\sigma \sim 10^8 - 10^5 \text{ Om}^{-1} \text{ m}^{-1}$ . Для изоляторов  $\sigma < 10^{-12} \text{ Om}^{-1} \text{ m}^{-1}$ .

Характерна температурная зависимость электрических свойств полупроводников. В отличие от металлов с увеличением температуры сопротивление полупроводников падает. Опыт дает зависимость сопротивления полупроводников от температуры в виде

$$R = R_0 e^{-\frac{E_a}{kT}},\tag{17.1}$$

где  $E_a$  – энергия активации, величина характерная для полупроводников разного типа.

В некотором участке температур сопротивление полупроводников может расти с ростом температуры. Такие полупроводники называются вырожденными.

По типам носителей тока полупроводниковые вещества делятся на ионные и электронные. В ионных полупроводниках носителями тока являются ионы решетки, а в электронных – электроны и дыры. Ионные полупроводники не находят применения в стационарных приборах, поскольку прохождение через них тока сопровождается переносом вещества и разрушением полупроводника. Практическое значение имеют электронные полупроводники. Резкая зависимость сопротивления этих полупроводников от температуры и освещенности позволяет использовать их в качестве преобразователей соответствующих сигналов в электрические. Приборы называются терморезисторами, фоторезисторами и т. д.

К классу полупроводников относится большая часть веществ. К ним относятся чистые элементы B, C, Si, P, S, Ge, As, Se, Sn, Sb, Te, J. Эти элементы представляют собой компактную группу в таблице элементов. В табл. 17.1 они выделены жирной линией. Рядом с символом элемента указана ширина запрещенной зоны в электрон-вольтах. Она растет по группам слева направо, по периодам – снизу вверх. Полупроводниками являются также различные соединения, например соединения типа  $A^{I}B^{VII}$ (CuCl, AgBr, ...);  $A^{IV}B^{I}$  (Si, GeSi);  $A^{I}B^{VI}$  (Cu, Cu<sub>2</sub>O,...) и др.

Периоды / группы	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
II	Ru	В	C 5.2	Ν	0		
		1,1	· ·				
III		Al	Si 1,1	P 1,5	S 2,5	Cl	
IV			Ge	As 1,2	Se 1,7	Br	
			0,75				
V			Sn	Sb 0,12	Te	J	Xe
			0,08		0,36	1,25	
VI			Pb	Bi	Ро	At	

Таблица 17.1. Группа полупроводников

Собственные и примесные полупроводники. Полупроводники, проводимость которых обусловлена переходами электронов из заполненной валентной зоны в зону проводимости, называются собственными. Полупроводники, проводимость которых обусловлена ионизацией примеси, называются примесными. Примесные полупроводники в свою очередь делятся на электронные и дырочные полупроводники. В электронных полупроводниках основными носителями тока являются электроны, возникающие при ионизации атомов примеси. Такие примеси называются донорными, или донорами. В дырочном полупроводнике основными носителями тока являются дырки возникают в валентной зоне при переходах электронов этой зоны на примесные уровни. Такие примеси называются акцепторными, или акцепторами (принимающими).

### 17.2. Электрическая проводимость собственных полупроводников

Механизм проводимости собственных полупроводников рассмотрим на примере элемента четвертой группы, типичного полупроводника Ge. Атомы четырехвалентного германия образуют кубическую решетку, в которой каждый атом связан парноэлектронной связью с четырьмя ближайшими атомами. Двухмерная модель кристалла с такой связью при T = 0 К приведена на рис. 17.1, a.

Валентные электроны принадлежат своим атомам и, кроме того, благодаря перекрытию электронных облаков, они могут переходить от атома к атому при встречном движении других электронов – атомы обмениваются электронами и электроны могут перемещаться по всему кристаллу. Однако такое движение является чисто хаотическим и не может участвовать в направленном движении под действием внешнего электрического поля – ток в полупроводнике отсутствует. Для сотворения электрического тока валентные электроны нужно оторвать от атомов, сделать их свободными.

С точки зрения зонной теории ток в полупроводнике при низких температурах отсутствует, потому что все энергетические уровни валентной зоны заняты и некуда принять энергию такого взаимодействия. Зонная структура полупроводникового кристалла при T = 0 К представлена на рис. 17.1, б. Для перевода электронов в зону проводимости энергии электрического поля недостаточно. Чтобы электрон перешел в зону проводимости и стал свободным, нужна энергия, сравнимая с внутриатомной, и шириной запрещенной зоны. Такой энергией могут быть энергия теплового движения с учетом распределения электронов по энергиям, энергия фотонов или других энергичных частиц. Такие электроны создают простой электронный механизм проводимости.



Рис. 17.1

Однако в собственном полупроводнике есть и другой механизм создания электрического тока. Действительно, в валентной зоне после ухода электрона появилось свободное состояние (дыра), позволяющее электронам более глубоких уровней перемещаться, принимая, например, энергию внешнего электрического поля по полю. Перемещение дыры – это перемещение одного некомпенсированного положительного заряда атомов. Поэтому движение дырки, обусловленное движением совокупности электронов в противоположном направлении, производит перенос положительного заряда. Движение свободного состояния в глубь валентной зоны может рассматриваться как движение некоторой частицы, имеющей положительный заряд и некоторую эффективную массу. В собственном полупроводнике, следовательно, осуществляются электронный (отрицательный) и дырочный (положительный) механизмы проводимости. Число электронов в зоне проводимости всегда равно числу дырок в валентной зоне в собственном полупроводнике.

Распределение электронов и дырок по уровням рассмотрено в п. 16.2. В формировании электрических свойств полупроводника важную роль играют электроны и дырки вблизи границ зон: электроны – у дна зоны проводимости, а дырки – вблизи потолка валентной зоны. Зависимость энергии частиц от квазиимпульса для этих участков имеет форму обычной параболы (см. рис. 16.2), поэтому плотность состояний определяется соотношениями, аналогичными соотношению (16.7) с той разницей, что энергию необходимо отсчитывать от границ зон (рис. 17.2):

$$g_{c}(E) = 4\pi \left(\frac{m}{h^{2}}\right)^{\frac{3}{2}} V\left(E - E_{c}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(17.2)

И

$$g_{\nu}(E) = 4\pi \left(\frac{m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} V\left(E_{\nu} - E\right)^{\frac{1}{2}},$$
(17.3)

где выражение (17.2) относится к зоне проводимости;  $E_c$  – энергия у дна зоны, а выражение (17.3) – в валентной зоне;  $E_v$  – энергия вблизи потолка этой зоны.



Рис. 17.2

Положение уровня Ферми в полупроводниках определяется из условия электронейтральности, дающей условие  $N_p = N_n$ . Этот уровень должен быть ниже  $E_c$  и выше  $E_v$ . Из-за малости концентрации электронов проводимости и дыр в полупроводниках идеальный газ этих ча-

стиц остается невырожденным (см. текст в конце п. 16.2) и подчиняется классической статистике Больцмана (см. формулу (16.9)):

$$N_n = A_n e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}}; N_p = A_p e^{-\frac{E_F - E}{kT}} \bowtie A_n e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} = A_p e^{-\frac{E_F - E}{kT}}, \quad (17.4)$$

где  $A_n$  и  $A_p$  – соответствующие постоянные, получаемые из условия нормирования. Из условия (17.4) следует, что

$$E_{F} = \frac{E_{c} + E_{v}}{2} - \frac{kT}{2} \ln \frac{A_{n}}{A_{p}}.$$
 (17.5)

При температуре T = 0 К  $E_F = \frac{E_c + E_v}{2}$  и находится точно посреди запретной зоны (рис. 17.2), и с ростом температуры уровень Ферми повышается.

С учетом того, что ширина запрещенной зоны  $\Delta E = E_c - E_v$ , имеем:

$$\Delta E = 2(E_c - E_F) = 2(E_F - E_v).$$
(17.6)

В условиях, когда уровень Ферми находится между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны, а распределение электронов по разрешенным уровням переходит из распределения Ферми в распределение Больцмана, для электронов и дырок имеем соответственно:

$$f_n(E) = e^{-\frac{E-E_F}{kT}}; f_p(E) = e^{-\frac{E_F-E}{kT}},$$
(17.7)

а количество электронов в зоне проводимости

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE = \int_{E_c}^{\infty} 4\pi \left(\frac{m_n}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} V\left(E - E_c\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E - E_F}{kT}} dE = 2\left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}};$$

с учетом соотношения (17.6) получим

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} = N_c e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}.$$
 (17.8)

Аналогично для дырок в валентной зоне

$$p = N_v e^{\frac{\Delta E}{2kT}}.$$
 (17.9)

В выражениях (17.8) и (17.9)  $N_c$  и  $N_v$  – константы, что при температурах  $T \rightarrow 0$  К практически равны друг другу и равны некоторой константе  $N_0$ . Электропроводность полупроводника в первом приближении пропорциональна числу свободных носителей тока:

$$\sigma \sim n + p = 2N_0 e^{\frac{\Delta E}{2kT}}.$$
(17.10)

#### 17.3. Электрическая проводимость примесных полупроводников

Механизм проводимости электронных полупроводников рассмотрим на примере элемента четвертой группы, типичного полупроводника Ge с донорной примесью пятивалентного элемента. Атомы четырехвалентного германия образуют кубическую решетку, в которой каждый атом связан парноэлектронной связью с четырьмя ближайшими атомами. Если пятивалентный атом примеси, например фосфора, или мышьяка, или сурьмы, замещает в решетке нормальный атом, то после образования четырех ковалентных связей с ближайшими соседями останется один валентный электрон, который будет локализован вблизи атома примеси (рис. 17.3, *a*). При этом в энергетическом спектре кристалла у дна зоны проводимости появляется дополнительный энергетический уровень  $E_{\rm A}$  примесного атома, на котором находится «лишний» электрон (рис. 17.3, *б*).



Рис. 17.3

Избыточный электрон движется в кулоновском поле примесного атома. Если атом примеси получает энергию E (например, за счет тепловых колебаний решетки), превышающую  $E_c - E_{\pi}$  – энергию ионизации примеси ( $E_c$  – энергия электрона у дна зоны проводимости), то избыточный электрон оставляет атом примеси и становится носителем тока. На энергетической диаграмме это соответствует переходу электрона из донорного уровня в зону проводимости (см. рис. 17.3,  $\delta$ ). Избыточный электрон теперь имеет возможность обмениваться энергией с внешним электрическим полем, перемещаясь на более высокие свободные уровни в зоне проводи мости, стать электроном проводимости. В целом же кристалл остается электронейтральным, поскольку электрон остается в кристалле. Энергии ионизации доноров  $E_i = E_c - E_{\pi}$  (в электрон-вольтах) у германия и кремния приведены в табл. 17.2.

В первом столбце указан элемент основного кристалла и ширина запрещенной зоны  $\Delta E$ .

Таблица 17.2. Значения энергий ионизации для донорных примесей

Легирующий элемент	Р	As	Sb
Si, $\Delta E = 1,14$ $\Im B$	0,045	0,049	0,039
Ge, $\Delta E = 0.67$ $\Im B$	0,0120	0,0127	0,0096

Механизм проводимости дырочных полупроводников рассмотрим на примере трехвалентной примеси бора. Подобно тому, как введение в Ge или Si примесей атомов пятивалентного элемента приводит к появлению электронов, введение примеси атомов трехвалентных элементов приводит к появлению дырок незаполненных химических связей (рис. 17.4, *a*). При этом вблизи потолка валентной зоны появляются свободные энергетические уровни примесного атома (рис. 17.4, *б*).



Рис. 17.4

Если один из электронов в валентной зоне получает достаточную энергию для перехода на акцепторный уровень  $E_{a}$ , то происходит ионизация примеси – атом примеси становится отрицательным ионом,

а дырка становится подвижной. В электрическом поле дырка ведет себя подобно положительному заряду, двигая в направлении вектора напряженности электрического поля (см. п. 17.2).

Примеси, захватывающие электроны из валентной зоны, называются акцепторами. Значения энергий ионизации акцепторов в германии и кремнии приведены в табл. 17.3 (энергия указана в электрон-вольтах).

Легирующий элемент	В	Al	Ga	In
Si, $\Delta E = 1,14$ $\Im B$	0,045	0,057	0,065	0,16
Ge, $\Delta E = 0.67$ $\Im B$	0,0104	0,0102	0,0108	0,0115

Таблица 17.3. Значения энергий ионизации для акцепторных примесей

Кроме примесных атомов, появление разрешенных уровней в запрещенной зоне связано также с нарушением идеальной периодичности решетки: вакансии, атомы в междоузлиях, дислокации и т. д. При облучении полупроводника электромагнитным излучением высоких частот, быстрыми электронами и другими частицами высоких энергий в кристаллической решетке возникают так называемые радиационные дефекты, которые также могут образовывать дополнительные уровни в запрещенной зоне.

Исследования положения уровня Ферми в примесных полупроводниках, проведенные аналогично тому, как это выполнено для чистых полупроводников (см. п. 17.2), приводят к следующим результатам. При T = 0 К уровень Ферми лежит внутри между  $E_c$  и донорным уровнем. С ростом температуры он сначала повышается, приближаясь ко дну зоны проводимости, проходит через максимум, затем опускается. Результаты для акцепторного полупроводника такие же, как для донорного, если характеристики донора заменить характеристиками акцептора.

Положение уровней Ферми в полупроводниках при T = 0 К приведено на рис. 17.5. На рис. 17.5, *а* представлен собственный полупроводник, а на рис. 17.5, *б* и 17.5, *в* – соответственно донорный и акцепторный полупроводники.

Концентрация электронов и дырок определяет удельную электропроводность полупроводника, поскольку энергия ионизации примесей сравнима с энергией тепловых колебаний решетки (kT = 0,026 эВ при комнатной температуре), то в первую очередь активизируется примесный механизм. Если, например, концентрация электронов в зоне проводимости преобладает над концентрацией дырок, то проводимость полупроводника будет электронной, а полупроводник – электронным или *n-типа*. Если преобладает концентрация дырок над концентрацией электронов, то проводимость будет *дырочной*, а полупроводник – *дырочным* или *p-типом*.



Рис. 17.5

С повышением температуры концентрация примесных носителей тока быстро достигает насыщения – *примесь истощается*, а собственная проводимость (смешанного типа) растет и при высоких температурах становится определяющей электропроводностью полупроводника. Зависимость логарифма концентрации носителей тока, а значит, и электропроводности полупроводника от оборотной температуры приведена на рис. 17.6. При низких температурах (1/T большое) существенную роль играет примесная проводимость (участок 1); участок 2 соответствует температурам истощения примесей; на участке 3 проводимость практически собственная.

Тип проводимости полупроводника можно установить экспериментально, используя результаты исследования эффекта Холла в полупроводниках.



Рис. 17.6

## 17.4. Контактные явления в полупроводниках. Свойства *p-n-*перехода

Рассмотрим электрический контакт двух полупроводников разной примесной проводимости. Электрический контакт обеспечивается, если в том же образце полупроводникового материала один участок имеет *p-проводимость*, а другой – *n-проводимость* (рис. 17.7).

В силу того, что концентрации электронов и дырок по разные стороны от участка контакта резко различны, начнутся диффузионные процессы: электроны переходят в область с *p*-проводимостью, а дырки, напротив, – в область с электронной проводимостью. Так как до начала процессов диффузии оба участка были электрически нейтральными, то область с *p-проводимостью* заряжается отрицательно, а с *n-проводимостью* – положительно.

Возникает электрическое поле  $\vec{E}$ , направленное от *n*-области к *p*-области, что препятствует процессу диффузии.



Через некоторое время устанавливается динамическое равновесие с двойным слоем разноименных зарядов, характеризующееся равновесным значением напряженности поля  $\vec{E}_i$  и определенной контактной разностью потенциалов  $U_{\kappa}$  (рис. 17.8). В процессе перемещения носителей они, встречаясь, взаимно нейтрализуются (рекомбинируют): электрон занимает место дырки и, следовательно, исчезает пара носителей тока. Происходит это в некотором узком приконтактном слое кристалла (выделенная штриховкой область на рис. 17.8), который становится таким образом обедненным носителями тока и имеет большое удельное сопротивление. Сопротивление этого слоя электрическому току зависит также от его глубины *l*. Глубина приконтактного слоя определяется количеством перемещенных носителей тока, необ-

ходимых для создания данной разности потенциалов  $U_{\kappa}$ . Она может быть оценена, если рассматривать двойной электрический слой как плоский конденсатор емкости.

$$C = \frac{\Delta q}{U_{\rm K}} = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 S}{l},\tag{17.11}$$

где  $\Delta q = enSl - заряд$ , перенесенный в процессе диффузии одним видом носителей тока (модуль заряда одной из «пластин» конденсатора);

е – заряд носителей тока;

*n* – концентрация носителей;

S – площадь поперечного сечения зоны контакта.

Подстановка выражения для перемещенного заряда позволяет вычислить *l*:

$$\frac{enSl}{U_{\kappa}} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0 S}{l} \Longrightarrow l = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{en}} U_{\kappa}.$$
(17.12)

Контактная разность потенциалов обычно порядка одного вольта. Диэлектрическая проницаемость, например, германия  $\varepsilon = 16$ ;  $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \, \Phi/\text{m}$ ;  $n \approx 10^{21} \, 1/\text{m}^3$ . Подстановка данных в формулу (17.12) дает результат  $l \approx 10^{-6}$  м, что составляет тысячи межатомных слоев и приводит к большому сопротивлению при контактном слое в целом. Именно этот двойной электрически заряженный слой, обедненный основными носителями тока, носит название запорного слоя или *p-n-nepexoda*.

Рассмотренные выше процессы в *p-n-nepexode* схематичны. В действительности примесная проводимость осуществляется на фоне проводимость базового кристалла германия или кремния, а она и есть проводимость смешанного типа (см. п. 17.2). Следовательно, наряду с основными примесными носителями тока, существуют неосновные: у *p-областии* – это электроны, а у *n-областии* – дырки. Электрическое поле двойного электроны, а у *n-областии* – дырки. Электрическое поных носителей заряда. Однако это поле будет ускоряющимся для не основных носителей заряда, и они начнут переходить в области с противоположной электропроводностью. Переход основных носителей приводит к уменьшению объемного заряда и электрического поля в переходе. Как следствие, имеет место дополнительный диффузионный ток основных носителей, в результате чего электрическое поле в переходе стремится к исходному значению. В конечном итоге устанавливается динамическое равновесие, при котором через *p-n-nepexod* двигаются два встречных потока носителей тока, взаимно компенсирующих друг друга. Суммарная плотность тока через *p-n-nepexod* в равновесном состоянии равна нулю.

Сопротивление двойного электрического слоя в полупроводниках сильно зависит от полярности подключения внешнего источника тока. Подключение внешнего источника тока к *p*-*n*-переходу положительным полюсом к *p*-области, а отрицательным – к *n*-области способствует уменьшению высоты потенциального барьера, уменьшает глубину l этого слоя (см. формулу (17.12) и рис. 17.8), что способствует обновлению диффузионных потоков носителей и прохождению тока через *p-п*-переход. Такое подключение называется прямым, или пропускным. Направление подключения, когда к *n*-области включают плюс, а р-области – минус, способствует увеличению высоты потенциального барьера и увеличивает глубину *l* этого слоя. Основной ток через *p-n*-переход отсутствует. Это направление включения называется обратным, или запирающим. Таким образом, *p*-*n*-переход имеет ярко выраженную одностороннюю проводимость, что и определяет его использование как нелинейного элемента в электрических цепях для выпрямления, например переменного тока и др.

Благодаря наличию, наряду с примесной, основной проводимости базовых материалов кристаллов и неосновных носителей, электрическое поле *p*-*n*-перехода способствует движению неосновных носителей, т. е. через переход идет обратный ток. Этот ток в миллионы раз меньше основного, однако создает дополнительные трудности в использовании полупроводниковых приборов. В частности, в процессе работы материал кристалла разогревается, что способствует росту собственной проводимости и увеличению обратного тока. При достижении температур, когда примесная проводимость истощается (см. п. 17.3 и рис. 17.6), ток прямого и обратного направления практически сравняется, *p*-*n*-переход исчезнет. Для борьбы с такими явлениями требуется стабилизация температурного режима работы полупроводниковых устройств.

Примечания. 1. Полупроводники и собственные, и примесные пропускают электрический ток в прямом и обратном направлениях совершенно одинаково. Вентильные свойства имеет только *p*-*n*-переход.

2. Контакт двух разных металлов дает такую же по величине контактную разность потенциалов, однако, благодаря тому, что концентрация электронов проводимости в металлах в миллионы раз больше, чем у полупроводников, приконтактный слой у них (см. формулу (17.12)) меньше одного межатомного расстояния и не создает значительного сопротивления току. Однако контакт «полупроводник – металл» в том случае, когда носители переходят из полупроводника в металл, имеет одностоворонною проводимости и по принятой договоренности также называется *p*-*n*-переходом.

Основной характеристикой полупроводникового диода есть его вольт-амперная характеристика, т. е. зависимость силы тока через прибор при прямом и обратном напряжениях, прикладываемых к нему (рис. 17.9). Так как обратный ток в десятки миллионов раз меньше прямого, то на едином рисунке и в едином масштабе график можно представить только условно.

Основным рабочим параметром диода является коэффициент выпрямления, устанавливающий отношение прямого и обратного токов через прибор при равных по модулю напряжениях:

T



$$k = \frac{I_{\rm np}}{I_{\rm obp}}; \quad U_{\rm np} = U_{\rm obp}.$$
 (17.13)

Рис. 17.8

Рис. 17.9

Особенности вольт-амперной характеристики диода позволяют понять его выпрямляющее и детектирующее свойства. На рис. 17.9 представлены графики подаваемого на диод синусоидального напряжения и результат превращения его в практически знакопостоянный пульсирующий ток после диода. Обратный ток в миллионы раз меньше прямого. Однако его наличие неизбежно даже теоретически.

# Тема 18. ТЕПЛОВЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ

18.1. Теплоемкость металлических кристаллов. Вырожденный ферми-газ электронов в металле. Энергия Ферми. Теплоемкость электронного газа.

18.2. Термоэлектрическая эмиссия. Контактные электрические явления в металлах. Термоэлектронные явления Зеебека, Пельтье и Томсона.

# 18.1. Теплоемкость металлических кристаллов. Вырожденный ферми-газ электронов в металле. Энергия Ферми. Теплоемкость электронного газа

Как было указано в п. 14.1, классическая электронная теория металлов не дает возможности понять, почему электронный газ свободных электронов, находящийся в состоянии теплового равновесия с узлами кристаллической решетки металлических кристаллов, не дает своего вклада в теплоемкость металлов. Ответ на этот вопрос дает квантовая теория металлов, рассматривающая электронный газ металлов как вырожденный ферми-газ (см. п. 16.2), подчиняющийся распределению электронов по энергии Ферми – Дирака

$$dN(E) = f(E)g(E)dE = 2\frac{4\pi m^{3/2}V\sqrt{E}}{h^3}\frac{dE}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}}+1}.$$
 (18.1)

В формуле (18.1) коэффициент 2 связан с тем, что данную энергию могут иметь два электрона с антипараллельными спинами. Таким образом, концентрация электронов с энергиями в интервале (*E*, *E* + *dE*):

$$dn(E) = \frac{dN(E)}{V} = \frac{8\pi m^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}}{h^3} \frac{dE}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1}.$$
 (18.2)

Исходя из того, что  $E_F$  – это максимальная энергия электронов ферми-газа при 0 К, и исходя из рассмотренных в п. 16.2 свойств функции Ферми – Дирака (см. формулу (16.8) и его свойство 1 и рис. 16.5), имеем для общей концентрации электронов:

$$n(E) = \frac{8\pi m^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{8\pi m^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{2}{3} E_F^{\frac{3}{2}}.$$
 (18.3)

Из формулы (18.3) следует, что энергия Ферми:

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3m}{8\pi}\right)^{\frac{1}{3}}$$
(18.4)

определяется в основном концентрацией электронов проводимости. Зависимость от температуры связана, например, с изменением объема тела при изменении температуры. Зависимость энергии Ферми от температуры имеет следующую форму:

$$E_{FT} = E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{2} \left( \frac{kT}{E_F} \right)^2 \right].$$
 (18.5)

Учитывая, что  $kT \ll E_F$ , это действительно очень малая поправка. Среднее значение энергии электронов проводимости  $\langle E \rangle = \int_{0}^{\infty} Eg(E)f(E)dE = \frac{3}{5}E_{FT}$  и при концентрации электронов проводимости в металлах n~10<sup>29</sup> м<sup>-3</sup>, имеем для среднего значения энергии

электронов проводимости

что значительно превышает энергию колебаний узлов кристаллической решетки

$$\langle E \rangle \approx kT = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\Pi \text{m}}{\text{K}} \cdot 300 \text{ K} \approx 4 \cdot 10^{-24} \Pi \text{m} \approx 0,025 \text{ sB}.$$

Это значит, что температура электронного газа соответствует десяткам тысяч кельвинов, электронный газ действительно вырожденный и не подчиняется классическому распределению Максвелла – Больцмана

$$\langle E \rangle \approx kT = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\Pi \kappa}{\mathrm{K}} \cdot 300\mathrm{K} \approx 4 \cdot 10^{-21} \mathrm{\Pi \kappa} \approx 0,025 \mathrm{B}.$$

Теплоемкость одного моля электронного газа  $C_M = \frac{\partial U_M}{\partial T}$ , где

 $U_{M} = N_{A} \langle E \rangle = N_{A} \frac{3}{5} E_{F} \left[ 1 - \frac{\pi^{2}}{2} \left( \frac{kT}{E_{F}} \right)^{2} \right]$  внутренняя энергия одного

моля электронного газа. Таким образом,

$$C_{M} = \frac{\pi^{2} N_{A} k^{2}}{2 E_{F}} T.$$
(18.6)

При значении температуры Т  $\rightarrow 0$  К молярная теплоемкость электронов проводимости также стремится к нулю:  $C_M \rightarrow 0$  и электроны проводимости не принимают участия в обмене теплом с узлами кристаллической решетки металла. Этим объясняется исполнение закона (15.1), закона Дюлонга – Пти для металлических кристаллов.

## 18.2. Термоэлектрическая эмиссия. Контактные электрические явления в металлах. Термоэлектронные явления Зеебека, Пельтье и Томсона

Термоэлектрическая эмиссия – это явление выхода (эмиссии) электронов с поверхности накаленных твердых (как правило) тел. Как указано в предыдущем пункте (см. п. 18.1), электроны проводимости в металлах при не очень высоких температурах находятся в вырожденном состоянии с энергиями, близкими к энергии Ферми (см. п. 16.2 и рис. 16.6). Электроны проводимости, таким образом, можно считать, в первом приближении, находящимися в прямоугольном потенциальном ящике. Распределение электронов по энергиям (см. формулу (17.1)) и при разных температурах металла графически представлено на рис. 18.1. С нуля кельвинов электроны проводимости расположены на разрешенных уровнях, находящихся ниже энергии Ферми Е<sub>F</sub> (график распределения 1 на рис. 18.1). Уровень, соответствующий энергии Ферми, заполнен до половины. Для того чтобы электроны смогли выйти за пределы металла, им необходимо предоставить энергию  $E = 0 - E_F$ , определяющую собой так называемую работу выхода  $A_{\rm B} = E = |E_{\rm E}|$ . (Электрон за пределами металла имеет нулевую энергию. Энергия Ферми – отрицательная.) Такую энергию электроны проводимости могут получить за счет тепловой энергии. С увеличением температуры график-ступенька размывается (кривая 2), и при некоторой температуре, характерной для каждого материала, часть электронов получает возможность выйти за пределы металла. Эта часть (залитая

темным цветом часть кривой 3 на рис. 18.1) будет увеличиваться с ростом температуры.



Рис. 18.1

Явление термоэлектронной эмиссии можно рассматривать как процесс испарения электронов из эмиттера. На эмиссию электронов уходит тем больше теплоты, чем больше работа выхода. Ее можно изменять за счет легирования металлов, например, редкоземельных элементов. Процесс выхода электронов из металла приводит к созданию его положительного электрического заряда, между «испаренными» электронами и металлом создается электрическое поле, втягивающее эмитированные электроны в металл. При динамическом равновесии между эмитированными и конденсированными электронами создается определенная концентрация электронов в электронном облаке, которое удерживается у поверхности металла. Она может быть рассчитана по термодинамическому рассмотрению системы: эмиттер – равновесный электронный газ. Если создать внешнее электрическое поле, то возникнет электрический ток, который может расти до определенного значения плотности тока, когда все эмитированные электроны примут участие в создании насыщенного тока. Плотность тока насыщения *j* связана с равновесной концентрацией электронов в электронном облаке (при данной температуре определенного эмиттера) и определяется соотношением:

$$j = AT^2 e^{\frac{A_*}{kT}},\tag{18.7}$$

где А – некоторая постоянная величина.

Контактные электрические явления в металлах. Если привести в электрический контакт разные металлы (рис. 18.2), то, в случае термодинамического равновесия, энергии Ферми всех тел сравняются.



Рис. 18.2

Если это разные металлы, то на границе металлов возникнет разность потенциалов – контактная разница потенциалов:

$$\Delta \varphi = \frac{E_{F2} - E_{F1}}{e},\tag{18.8}$$

где е – элементарный заряд.

Термоэлектрическими называются физические явления, обусловленные наличием взаимосвязи между тепловыми и электрическими процессами в электрических проводниках.

*Явление Зеебека*. В 1821 г. немецкий физик Томас Иоганн Зеебек обнаружил, что при образовании замкнутой цепи из двух различных металлов и их неодинаковой температуре, в цепи течет электрический ток.

Изменение знака у разности температур металлов сопровождается изменением направления тока. Возникающий в замкнутой цепи ток, при различной температуре контактов, называется термоэлектрическим. Если цепь разорвать в произвольном месте, то на концах разомкнутой цепи появится разность потенциалов, называемая термоэлектродвижущей силой. Это явление по имени первооткрывателя называется эффектом Зеебека.

Эффект Зеебека – это явление возникновения ЭДС в электрической цепи, состоящей из последовательно соединенных разнородных проводников, контакты между которыми находятся при различных температурах.

В относительно небольшом температурном интервале термо-ЭДС пропорциональна разности температур контактов (спаев).

Контактная разность потенциалов между электродами для разомкнутой цепи определяется выражением:

$$\Delta \varphi = \frac{A_2 - A_1}{e} + \frac{k}{e} T \ln \frac{n_{01}}{n_{02}}, \qquad (18.9)$$

где A<sub>1</sub> и A<sub>2</sub> – работа выхода электрона из первого и второго металла;

е-заряд электрона;

*k* – постоянная Больцмана;

*n*<sub>01</sub> и *n*<sub>02</sub> – концентрация свободных электронов соответственно в первом и втором металлах.

Для замкнутой цепи, состоящей из двух проводников, электродвижущая сила, приложенная в этой цепи, равна алгебраической сумме разностей потенциалов всех спаев:

$$\varepsilon_{12} = (\varphi_1 - \varphi_2) + (\varphi_2 - \varphi_1).$$

При одинаковых температурах спаев получим  $\varepsilon_{12} = 0$ . Если же контакты (спаи) имеют разные температуры  $T_1$  и  $T_2$ , причем  $T_1 > T_2$ , то

$$\varepsilon_{12} = \frac{k}{e} \ln \frac{n_{01}}{n_{02}} (T_1 - T_2) = \alpha (T_1 - T_2), \qquad (18.10)$$

где коэффициент пропорциональности α называют относительной дифференциальной, или удельной, термо-ЭДС. Оценить значение α можно по формуле:

$$\alpha = \frac{k}{e} \ln \frac{n_{01}}{n_{02}} \ . \tag{18.11}$$

Явление Зеебека используется для измерения температуры. Для этого применяются термопары – устройства, состоящие из двух соединенных точечной сваркой разнородных проводников. С помощью термопар можно измерять как незначительные нагревания, порядка сотых долей градуса, так и высокие температуры, значения которых ограничены температурой плавления металлов проводников термопары. Явление Зеебека может быть использовано и для генерации электрического тока не очень большой мощности. Термопары из полупроводниковых материалов обладают гораздо большим КПД, чем металлы, и иногда их используют в качестве небольших генераторов для питания радиоаппаратуры.

Яление Пельтье обратно явлению Зеебека и заключается в том, что при прохождении через контакт двух различных проводников электрического тока в зависимости от его направления помимо теплоты Джоуля – Ленца выделяется (или поглощается – в зависимости от направления тока) дополнительная теплота.

Количество выделившегося или поглощенного в спае тепла пропорционально заряду *q*, прошедшему через спай:

$$Q_{A,B} = P_{A,B} \cdot q = P_{A,B} It , \qquad (18.12)$$

где  $P_{AB}$  – коэффициент Пельтье (последовательность *AB* указывает направление тока);

*I* – сила тока;

*t* – время его пропускания.

При изменении направления тока вместо выделения (поглощения) тепла наблюдается поглощение (выделение) такого же количества тепла при прочих равных условиях:

$$P_{A,B} = -P_{B,A} \tag{18.13}$$

Из законов термодинамики вытекает, что коэффициент Пельтье и удельная термо-ЭДС связаны соотношением:

$$P_{A,B} = \alpha \cdot T , \qquad (18.14)$$

где Т – термодинамическая температура.

Явление Пельтье используется, например, в термоэлектрических полупроводниковых холодильниках.

Дополнительное поглощение или выделение тепла проводником также наблюдается, если ток будет протекать по проводнику с градиентом температуры в направлении протекания тока. Данный эффект называют эффектом Томсона. Явление Томсона предсказано им в 1856 г. и впоследствии было обнаружено экспериментально.

Эффект Томсона объясняется аналогично эффекту Пельтье. Если вдоль проводника, по которому протекает ток, существует градиент температуры, и если ток течет в направлении возрастания температу-

ры, то электроны движутся из мест с более высокой температурой и более высокой кинетической энергией в области с более низкой температурой. В результате происходит торможение электронов, которые передают избыточную энергию окружающим атомам в процессе столкновения, т. е. выделяется теплота.

Практического применения эффект Томсона не нашел, но его можно использовать для определения типа примесной проводимости полупроводников.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Физика для вузов. Электричество и магнетизм. Оптика. Строение вещества: учеб. пособие / И. И. Наркевич [и др.]. – Минск: Выш. шк., 1992.

2. Бутиков, Е. Н. Оптика / Е. Н. Бутиков. – М.: Высш. шк., 1987.

3. Тарасов, Л. В. Основы квантовой механики / Л. В. Тарасов. – М.: Высш. шк., 1978.

4. Савельев, И.В. Курс общей физики: учеб. пособие для втузов: в 3 т. / И.В. Савельев. – 7-е изд., стер. – СПб.: Лань, 2007. –Т. 2: Электричество и магнетизм. Волны. Оптика. – 496 с.

5. Савельев, И.В. Курс общей физики: учеб. пособие для втузов: в 3 т. / И.В. Савельев. – 7-е изд., стер. – СПб.: Лань, 2007. – Т. 3: Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – 317 с.

6. Детлаф, А.А. Курс физики: в 3 т. / А.А. Детлаф, Б.М. Яворский, Л. Б. Милковская. – М.: Высш. шк., 1979. – 3 т.

7. Зисман, Г. А. Курс общей физики: в 3 т. / Г. А. Зисман, О. М. Тодес. – М.: Наука, 1968. – 3 т.

8. Трофимова, Т. И. Курс физики / Т. И. Трофимова. – М.: Высш. шк., 1990.

9. Сена, Л. А. Единицы физических величин и их размерности / Л. А. Сена. – М.: Наука, 1988.

 Ландау, Л. Д. Курс теоретической физики: Учеб. пособ. для вузов: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – 6-е изд., испр. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – Т. 3: Квантовая механика (нерелятивистская теория). – 800 с.

11. Павлов, П. В. Физика твердого тела: учебник / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – 3-е изд., стер. – М.: Высш. шк., 2000.

12. Иродов, И.Е. Волновые процессы. Основные законы: учеб. пособие / И. Е. Иродов. – 3-е изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 263 с.

 Иродов, И. Е. Квантовая физика. Основные законы: учеб. пособие для вузов / И. Е. Иродов. – 2-е изд., доп. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2004. – 256 с.

14. Лозовский, В. Н. Курс физики: в 2 т. / В. Н. Лозовский. – 6-е изд., испр. и доп. – СПб.: Лань, 2009. – Т. 2: Квантовая физика. Статистическая физика и термодинамика. Современная физическая картина мира. – 608 с.

15. Сивухин, Д. В. Общий курс физики: учеб. пособие для вузов / Д. В. Сивухин. – М.: Физматлит, 2018. – Т. 4: Оптика.

16. Ландсберг, Г. С. Оптика: учеб. пособие для вузов / Г. С. Ландсберг. – 7-е изд., стер. – М.: Физматлит, 2017.

ВВЕДЕНИЕ	3
I. ОПТИКА	4
Тема 1. ИНФОРМАЦИЯ ПО ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ И ВОЛНОВОЙ ОПТИКЕ	4
1.1. Общие сведения по геометрической оптике	4
1.2. Общие сведения по волновой оптике	7
Тема 2. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ СВЕТА	9
2.1. Интерференция света и условия его наблюдения. Интерференция	
от двух точечных когерентных источников света	9
2.2. Особенности световых волн. Временная и пространственная когерентности	5
световых потоков. Принципы получения когерентных световых потоков	14
2.3. Интерференция света в тонких пленках. Полосы равной толщины	
и равного наклона. Кольца Ньютона	18
2.4. Практическое использование интерференции	21
Тема 3. ДИФРАКЦИЯ СВЕТА	22
<ol> <li>З.1. Дифракция волн. Дифракция света. Принцип Гюйгенса – Френеля.</li> </ol>	
Метод зон Френеля	22
3.2. Дифракция Френеля от круглого отверстия в диафрагме	
и от круглого экрана. Светлое пятно Пуассона	26
3.3. Дифракция Фраунгофера. Роль линзы в наблюдении дифракционной карти	ны.
Таутохронизм оптических систем. Дифракция от щели и двух щелей между	
полуплоскостями	28
3.4. Дифракционная решетка. Формула решетки. Характеристики	
дифракционной решетки как спектрального устройства	32
3.5. Дифракция рентгеновского излучения на пространственной решетке.	
Формула Вульфа – Брэгга	37
Тема 4. ПОЛЯРИЗАЦИЯ СВЕТА	38
4.1. Поляризация волн. Виды поляризации. Закон Малюса	38
4.2. Поляризация света при прохождении границы раздела двух прозрачных	
диэлектриков. Закон Брюстера. Стопа Столетова	41
4.3. Поляризация света в оптически анизотропных средах. Двойное	
лучепреломление. Призма Николя. Дихроизм. Поляроиды	43
4.4. Интерференция поляризованного света. Цвета тонких кристаллических	
пластинок	44
4.5. Искусственная оптическая анизотропия. Анализ упругих деформаций.	
Эффект Керра	45
Тема 5. ТЕПЛОВОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ	47
5.1. Виды электромагнитного излучения. Тепловое излучение. Равновесность	
теплового излучения. Характеристики теплового излучения и их взаимосвязь	47
5.2. Законы теплового излучения. Универсальная функция Кирхгофа. Абсолют	но
черное и серое тело	50
5.3. Элементы теории теплового излучения. Гипотеза и формула Планка	53
5.4. Понятие об оптической пирометрии	59
Тема 6. КВАНТОВАЯ ОПТИКА	61
6.1. Общие сведения по квантовой оптике	61
6.2. Явления фотоэлектрического эффекта. Законы фотоэффекта	62
6.3. Эффект Комптона и его теория	67
II. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА	71
Тема 7. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	71

### СОДЕРЖАНИЕ

7.1. Гипотеза де Бройля и ее опытное обоснование	71
7.2. Волны де Бройля. Пси-функция и ее физический смысл	74
7.3. Соотношение неопределенностей Гейзенберга	75
7.4. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера	
и стандартные требования к у-функции	77
Тема 8. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	78
8.1. Частица в прямоугольном одномерном ящике с бесконечно	
высокими стенками	79
8.2. Квантовый гармонический осциллятор	82
8.3. Поведение микрообъектов на прямоугольном одномерном барьере.	
Тоннельный эффект	87
Тема 9. ЭЛЕМЕНТЫ АТОМНОЙ ФИЗИКИ	90
9.1. Опыты Резерфорда. Ядерная модель атомов	90
9.2. Постулаты Бора. Теория атома водорода по Бору	91
Тема 10. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОБНЫ	Х
ИОНОВ	95
10.1. Общее уравнение Шрёдингера	95
10.2. Уравнение Шрёдингера для атома водорода и водородоподобных ионов.	
Квантование энергии, момента импульса и проекции момента импульса	96
10.3. Вырожденные состояния электрона и кратность их вырождения по энергии	И.
Спектр атома водорода и водородоподобных ионов	100
10.4. Состояния электронов в атоме водорода. Электронные облака.	
Электронные орбитали	102
10.5. Спин электрона. Опыты Штерна и Герлаха. Состояния электронов	
в атоме водорода и водородоподооных ионах	105
Тема II. МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ	10/
11.1. Осооенности исследования многоэлектронных атомов квантовой механики	4.
энергетические слои. принцип паули. принцип неразличимости тождественны	107
частиц. Объяснение закономерностей таолицы элементов	107
п.2. Рентеновское излучение. Сплошной и линеичатый рентеновские	110
спектры Тема 12 МОЛЕКУЛЫ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СПЕКТРЫ	.110
	114
12.1. Молскулы. Биды химических связей и типы молскул. Ковалентная связы	
пасседние. Понятие о развоспектроскопии	116
12.3. Поглошение и излучение энергии молекулами. Вынужленное излучение	
Принципы работы квантовых генераторов	119
Принцины работы квантовых теператоров	124
Тема 13 ТВЕРЛЫЕ ТЕЛА КЛАССИФИКАНИЯ ТВЕРЛЫХ ТЕЛ	
ПО ТИПАМ СИЛ СВЯЗИ	124
Тема 14. ОБШИЕ СВЕЛЕНИЯ ПО КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ТВЕРЛЫХ ТЕЛ	126
14.1. Понятие о квантовой статистике. Распределение состояний и функции	
заполнения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака	126
14.2. Понятие о вырождении квантовых систем. Вырожденный бозе-газ	
и формула Планка	130
Тема 15. ТЕПЛОЕМКОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ	132
15.1. Проблемы классической теории теплоемкости твердых тел.	
Закон Дюлонга – Пти. Теория теплоемкости кристаллов Эйнштейна	132
15.2. Теория теплоемкости кристаллов по Дебаю	135
Тема 16. ЭЛЕМЕНТЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА	138

16.1. Общие понятия об энергетических зонах в кристаллах и основные	
выводы зонной теории	138
16.2. Динамика движения электронов в кристаллах и особенности функции	
распределения Ферми – Дирака	141
16.3. Классификация твердых тел по электропроводности	146
Тема 17. ПОЛУПРОВОДНИКИ И ИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА	147
17.1. Электрические свойства полупроводников	147
17.2. Электрическая проводимость собственных полупроводников	149
17.3. Электрическая проводимость примесных полупроводников	153
17.4. Контактные явления в полупроводниках. Свойства <i>p-n</i> -перехода	157
Тема 18. ТЕПЛОВЫЕ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ	161
18.1. Теплоемкость металлических кристаллов. Вырожденный ферми-газ	
электронов в металле. Энергия Ферми. Теплоемкость электронного газа	161
18.2. Термоэлектрическая эмиссия. Контактные электрические явления в мета	ллах.
Термоэлектронные явления Зеебека, Пельтье и Томсона	163
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	169