МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Омский государственный технический университет»

И. И. Гончар, М. В. Чушнякова

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР И ФЕМТОСТРУКТУР

Учебное текстовое электронное издание
локального распространения

*Рекомендовано редакционно-издательским советом
Омского государственного технического университета*

Омск
Издательство ОмГТУ
2022

Сведения об издании: 1, 2

© ОмГТУ, 2022

ISBN 978-5-8149-3410-9

УДК 530.145
ББК 22.314
Г65

Рецензенты:

А. Г. Козлов, д-р техн. наук, профессор кафедры общей, прикладной и медицинской физики, Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского;

Ю. М. Сосновский, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Физика и химия», Омский государственный университет путей сообщения

Гончар, И. И. Квантово-механическое моделирование наноструктур и фемтоструктур : учеб. пособие / И. И. Гончар, М. В. Чушнякова ; Минобрнауки России, Ом. гос. техн. ун-т. – Омск : Изд-во ОмГТУ, 2022. – 1 CD-ROM (2,06 Мб). – Систем. требования: процессор с частотой 1,3 ГГц и выше ; 256 Мб RAM и более ; свободное место на жестком диске 300 Мб и более ; Windows XP и выше ; разрешение экрана 1024×768 и выше ; CD/DVD-ROM дисковод ; Adobe Acrobat Reader 5.0 и выше. – Загл. с титул. экрана. – ISBN 978-5-8149-3410-9.

Рассмотрены явления, обусловленные взаимодействием на уровне элементарных частиц, атомных ядер, атомов, атомных слоев и требующие квантово-механического подхода к своему описанию и моделированию в силу малости взаимодействующих объектов. Изложены основные отличия квантового описания от классического. Представлены базовые модели, лежащие в основе квантово-механического моделирования нано- и фемтоструктур. Приведены оригинальные задания для самостоятельной проработки.

Издание предназначено для студентов магистратуры, обучающихся по направлению 28.04.02 «Наноинженерия».

Редактор *М. А. Болдырева*

Компьютерная верстка *Ю. П. Шелехиной*

Для дизайна этикетки использованы материалы из открытых интернет-источников

Сводный темплан 2022 г.
Подписано к использованию 11.02.22.
Объем 2,06 Мб.

© ОмГТУ, 2022

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

АЭС – атомная электростанция

БГОППЯ – бесконечно глубокая одномерная прямоугольная потенциальная яма

БИФ – базовая идея физики

ВАХ – вольт-амперная характеристика

ВТСП – высокотемпературная сверхпроводимость

ГМС – гигантское магнетосопротивление

ГО – гармонический осциллятор

ДК – джозефсоновский контакт

ДЭС – двойной электрический слой

ИСО – инерциальная система отсчета

КРП – контактная разность потенциалов

МКТ – молекулярно-кинетическая теория

МП – магнитное поле

МТ – мобильный телефон

ПК – персональный компьютер

ПП – полупроводник

ПЭ – потенциальная энергия

СиЯВ – сильное ядерное взаимодействие

СКВИД – сверхпроводящий квантовый интерферометр

СМ – Стандартная модель

СП – сверхпроводимость

ФВ – физическая величина

ЭМИ – электромагнитная индукция

iПП – собственный полупроводник (ПП i-типа)

nПП – электронный полупроводник (ПП n-типа)

pПП – дырочный полупроводник (ПП p-типа)

ВВЕДЕНИЕ

В основе современной физической теории лежат четыре базовые идеи. Первые три из них обсуждаются во многих учебниках. Там они называются основными положениями молекулярно-кинетической теории (МКТ) [1–3]. В результате складывается неверное представление, что они справедливы только при изучении молекулярной физики. На самом деле, можно построить всё «здание» физики [4], используя эти базовые идеи:

1) все тела состоят из частиц (структурных элементов);

2) эти частицы находятся в непрерывном хаотическом движении;

3) частицы взаимодействуют друг с другом, причём обычно на большом расстоянии они притягиваются, а на малом – отталкиваются;

4) с каждой частицей связан волновой вероятностный процесс [5].

Эти же базовые идеи лежат в основе квантового моделирования нано- и фемтоструктур.

Четвёртая идея позволяет выйти из серьезного затруднения, возникающего при попытке применить классическую физику – механику и электродинамику – для объяснения строения атома. Атом, в котором электроны движутся вокруг ядра по орбитам, как планеты вокруг Солнца, просто не может существовать! Причина в том, что если заряженная частица движется ускоренно (а движение по криволинейной траектории – это движение с ускорением), то она должна испускать электромагнитное излучение (волны). В результате электрон довольно быстро потеряет свою энергию и упадёт на ядро. Но в природе ничего подобного не происходит: атомы в основном состоянии существуют по крайней мере столько же, сколько сама Вселенная, т. е. около 13,5 млрд лет.

Итак, возникает необходимость построения совершенно специфической теории, которая объясняла бы явления, происходящие с частицами очень малой массы, которые движутся в очень малой области пространства. Такая теория была построена в первой трети XX века, её назвали квантовой механикой. Её создатели Н. Бор, М. Планк, Э. Шрёдингер, В. Гейзенберг [5–7]. Именно четвёртая базовая идея позволяет перекинуть мостик между классической и квантовой физикой.

1. ОБЩИЕ СВОЙСТВА ВОЛН

Большую часть информации об окружающем мире мы получаем с помощью волн. Это электромагнитные волны с длиной волны около половины микрона (так называемый видимый свет), радиоволны, а также звуковые волны. Волной называют колебания, которые распространяются в пространстве и переносят энергию без заметного переноса вещества. Поскольку четвёртая базовая идея физики состоит в том, что с каждой частицей связан волновой вероятностный процесс, представляется полезным привести кое-какие сведения о волнах.

Простейшей модельной волной является плоская монохроматическая волна. Уравнение такой волны, распространяющейся (бегущей) в положительном направлении оси z, имеет вид

$$\xi(z,t) = \xi_m \cos(\omega t - kz). \tag{1.1}$$

В этой формуле ξ_m – амплитуда волны; ω – циклическая частота волны; k – волновое число. Оно играет по отношению к пространству ту же роль, которую частота ω играет по отношению ко времени. В результате и формулы, связывающие частоту ω с периодом τ, а волновое число k – с длиной волны λ, оказываются сходными. Они имеют следующий вид:

$$\omega = 2\pi/\tau; \tag{1.2}$$

$$k = 2\pi/\lambda. \tag{1.3}$$

Величина, являющаяся аргументом косинуса, называется фазой волны α:

$$\alpha = \omega t - kz. \tag{1.4}$$

Важной характеристикой волны является её фазовая скорость v_{ph}. Её определение выражается формулой

$$\mathrm{v}_{ph} = \lambda/\tau = \omega/k. \tag{1.5}$$

Фазовая скорость показывает быстроту, с которой распространяется фаза волны (например, бежит её гребень). В средах без дисперсии фазовая скорость определяет также скорость переноса энергии. Вопроса о том, в какой среде распространяется квантовая волна, которая фигурирует в четвёртой базовой идее физики, не возникает.

Нам чаще придётся иметь дело со стоячими волнами, чем с бегущими. Типичные примеры стоячих волн – колебания струн виолончели или рояля, электромагнитные колебания внутри микроволновой печи. Стоячие волны возникают в благоприятных условиях при сложении и интерференции двух бегущих волн: падающей и отражённой. Благоприятные условия, как правило, заключаются в том, что в области пространства, отведённой для волны (резонаторе), укладывается целое число длин полуволн, т. е.

$$b = \frac{\lambda}{2}\,(n+1). \tag{1.6}$$

Здесь b – ширина резонатора; n – главное квантовое число, которое принимает значения 0, 1, 2 и т. д.

Обычно в резонаторе образуются волны разных длин. Тогда усилятся и накопятся именно те, для которых выполняется условие образования стоячих волн (1.6). Например, лазерное излучение накапливается в резонаторе лазера в виде стоячих волн.

Интерференция – одно из важнейших волновых явлений. Это устойчивое перераспределение энергии в пространстве при наложении когерентных волн. Когерентными называются две волны, разность фаз которых не изменяется со временем.

Верный признак интерференции – чередование максимумов и минимумов энергии в пространстве. Максимумы энергии в интерференционной картине возникают в тех местах, где разность хода двух интерферирующих волн равна чётному числу длин полуволн (иными словами, разность фаз равна 2π, в стоячей волне падающая и отражённая волны усиливают друг

друга). Минимумы возникают там, где разность хода двух интерферирующих волн равна нечётному числу длин полуволн (разность фаз равна π, в стоячей волне падающая и отражённая волны компенсируют друг друга). Стоячие волны являются одним из случаев интерференции.

Другое важное волновое явление – дифракция – состоит в отклонении волны от прямой при распространении в среде с резкими неоднородностями. Рассмотрим три типичных случая на примере прохождения световой волны через плоскую щель (см. рис. 1.2–1.4 ниже [8]). Пусть b – ширина щели (в общем случае – размер препятствия), λ – длина волны, L – расстояние от щели до экрана, на котором наблюдается дифракционная картина. Предполагается, что плоская световая волна падает на щель по нормали. Тогда для очень широкой щели, т. е. при

$$\frac{b^2}{\lambda L} \gg 1, \tag{1.7}$$

распределение интенсивности по экрану, на который падает свет, прошедший через щель, хорошо описывается геометрической оптикой (рис. 1.1): в пределах геометрической проекции щели на экран интенсивность постоянна, а вне этой проекции равна нулю. Лишь вблизи краёв проекции возникают осцилляции интенсивности, которые очень трудно заметить на фоне яркой проекции щели на экран. Эти осцилляции на рис. 1.1 искусственно усилены. Обращаем внимание читателя на то, что некоторые рисунки взяты из работ [8–14] и частично модифицированы.

Сужая щель, мы приходим к соотношению

$$\frac{b^2}{\lambda L} \simeq 1, \tag{1.8}$$

которое соответствует дифракции Френеля (рис. 1.2). В этом случае почти вся дифракционная картина сосредоточена в пределах геометрической проекции щели на экран, но она хорошо видна и характеризуется чередованием светлых и тёмных полос примерно одинаковой интенсивности.

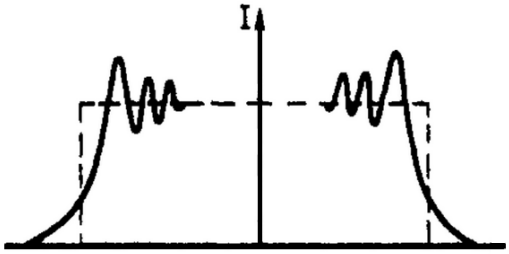

Рис. 1.1. Распределение интенсивности света при дифракции на широкой щели (пунктиром показано распределение интенсивности, предсказываемое геометрической оптикой)

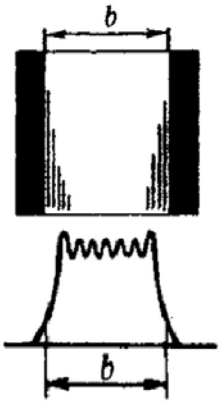

Рис. 1.2. Распределение интенсивности света для щели средней ширины (дифракция Френеля)

При дальнейшем сужении щели мы получим картину, изображённую на рис. 1.3. Распределение интенсивности при этом выходит за рамки геометрической проекции щели на экран, и начинает прорисовываться главный максимум, имеющий большую интенсивность.

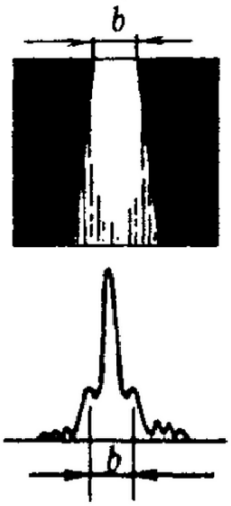

Рис. 1.3. Распределение интенсивности света при сужении щели (переход от дифракции Френеля к дифракции Фраунгофера)

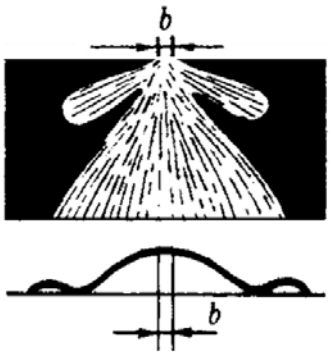

Рис. 1.4. Распределение интенсивности света для очень узкой щели (дифракция Фраунгофера)

Если и дальше сужать щель, то мы придём к случаю дифракции Фраунгофера, которому соответствует рис. 1.4. При этом

$$\frac{b^2}{\lambda L} \ll 1 \text{ и } \lambda < b. \tag{1.9}$$

В этом случае геометрическая проекция щели на экран ничтожна по сравнению с размером дифракционной картины. Эта картина состоит из мощного и широкого главного максимума, ширина которого Δx выражается формулой

$$\Delta x = 2L\left(\frac{b^2}{\lambda^2} - 1\right)^{-1/2}, \tag{1.10}$$

и слабых боковых максимумов. Такую дифракционную картину видел каждый: это звёзды, которые мы видим на небе, а также расплывающееся изображение лампочки, которое возникает, когда мы смотрим на неё, прищурившись.

Задания для самостоятельного выполнения

1.1. Перечислите базовые идеи физики. Приведите по три примера к каждой идее.

1.2. Покоящееся ядро Ts-293 испытывает альфа-распад. Напишите уравнение распада.

1.3. Ядро фтора-19, движущееся со скоростью 5,5 Мм/сек, налетает на покоящееся ядро свинца-204 и сливается с ним. Напишите уравнение реакции.

1.4. Вычислите модуль ускорения Земли при её движении вокруг Солнца.

1.5. Вычислите модуль ускорения кабинета ректора ОмГТУ, которое возникает благодаря суточному вращению Земли.

1.6. Получите уравнение стоячей волны с помощью формулы (1.1).

2. ФИЗИЧЕСКИЕ ЧАСТИ РЕЧИ

Физика представляет собой в некотором роде язык (систему терминов и их групп). Поэтому с самого начала целесообразно выделить эти группы (назовём их **физическими частями речи)**:

1) реальные природные объекты;

2) реальные технические объекты;

3) физические явления;

4) базовые идеи физики (БИФ);

5) базовые понятия физики;

6) физические величины (ФВ);

7) физические модели;

8) физические постоянные;

9) размерности ФВ;

10) определения ФВ;

11) физические законы;

12) полезные частные формулы.

Физика является: 1) основой нашего понимания окружающей природы (от греч. φυσις – природа) и 2) основой современной техники.

Сначала были поняты природные явления (Галилей наблюдал, как качаются светильники в соборе, пытаясь понять закономерности этого явления, определить период их колебаний), а уже потом эти закономерности легли в основу техники (например, на основе наблюдений Галилея были созданы маятниковые часы). Поскольку физика – наука экспериментальная, мы начнём с краткого обсуждения реальных (!) объектов и процессов (явлений), которые с ними происходят.

Реальные природные объекты можно «разложить» по размеру.

1. Фотон – частица (квант) света, не имеет размера, его невозможно локализовать. Это очень специфическая частица: она не имеет массы покоя, она всегда движется с постоянной скоростью относительно любой инерци-

альной системы отсчета (ИСО). В принципе, у фотона масса есть (фотоны оказывают давление), но только потому, что эта частица движется.

Энергию и массу фотона можно вычислить по формулам:

$$W_\phi = \hbar\omega; \tag{2.1}$$

$$m_\phi = \frac{W_\phi}{c^2}. \tag{2.2}$$

Самые низкочастотные фотоны соответствуют длинноволновому излучению (длина волны λ порядка километра), самые высокочастотные – коротковолновому (пикометры).

2. Нейтрино: о них мы знаем меньше, чем о фотонах, потому что нейтрино очень слабо взаимодействуют с веществом. Размера мы точно не знаем, но он меньше 10^{-18} м. У нейтрино точно есть масса покоя, очень маленькая, меньше, чем 10^{-4} массы электрона. Точное значение пока установить не удаётся.

3. Электрон: год «рождения» (открытия) – 1896-й. Имеет элементарный отрицательный заряд, у реальных объектов заряда меньше элементарного не бывает (кварки не наблюдаются в реальных процессах), заряд любого тела кратен элементарному заряду. Масса электрона 511 кэВ$/c^2$. Про размер электрона мы знаем мало: он меньше 10^{-18} м.

Фотон, нейтрино и электрон, по современным представлениям, являются бесструктурными объектами.

4. Протон: размер около 1 фм. Его структурными элементами являются 3 кварка, заряды которых дробные: $+2e/3$, $+2e/3$ и $-e/3$, в сумме получается $+e$. Масса протона примерно в 1800 раз больше массы электрона. Протоны являются структурными элементами атомных ядер. Периодическая таблица составлена в порядке возрастания числа протонов в ядре атома (оно называется зарядовым числом и обозначается Z).

5. Нейтрон очень похож на протон: чуть тяжелее (на несколько масс электрона), электронейтрален, имеет примерно такой же размер, тоже со-

стоит из трёх кварков с зарядами $-e/3$, $-e/3$ и $+2e/3$. Нейтроны являются структурными элементами ядер. В каждой клеточке Периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева (далее – Периодическая таблица) есть, как минимум, символ элемента, целое число (число протонов) и дробное число (если его округлить, получается примерно массовое число A, т. е. суммарное число протонов и нейтронов в ядре).

6. Фактически мы уже обсудили следующий по размеру реальный природный объект, т. е. атомное ядро, и его структурные элементы. Формула для вычисления радиуса ядра имеет вид

$$R_{я} = r_0 A^{1/3}, \tag{2.3}$$

где $r_0 \approx 1{,}2$ фм $= 1{,}2 \cdot 10^{-15}$ м имеет смысл радиуса нуклона; A – число нуклонов в ядре (протоны и нейтроны называют одним общим словом – нуклоны). Масса ядра приблизительно равна сумме масс протонов и нейтронов, входящих в ядро.

7. Следующий объект – атом. Его структурными элементами являются электроны и ядро. Электроны движутся, находясь на расстоянии примерно 0,1 нанометра от ядра, это и есть характерный размер (радиус) атома. На самом деле радиус атома периодически зависит от Z, однако простой формулы для этой зависимости нет.

8. Атомы складываются в молекулы: вода, углекислый газ, угарный газ, этиловый спирт, азот, кислород. Самые маленькие молекулы имеют примерно тот же размер, что и атомы, а самые большие – молекулы ДНК – имеют длину около 1 сантиметра.

9. Следующий объект – клетка. Эти объекты изучаются биофизикой и цитологией. Это минимальный структурный элемент живого организма; клетка состоит в основном из воды, так что её массу можно легко найти, зная размер клетки. Самые маленькие клетки – бактерии (одноклеточные организмы), самая большая клетка – яйцо страуса.

10. Млекопитающее (плотность – вода): самые маленькие – мыши (около 2 см); самый большой – синий кит (около 20 м).

11. Планета Земля – радиус 6400 км, средняя плотность 5 г/см^3.

12. Солнце – типичная звезда; внутри него происходят ядерные реакции, и в результате испускается электромагнитное излучение – фотоны, которые летят от Солнца вместе с электрон-протонной плазмой (солнечным ветром). Расстояние от Земли до Солнца – 150 млн км; диаметр Солнца – 1,5 млн км.

13. Солнечная система входит в состав нашей Галактики, которая называется Млечный Путь. Если в ясную ночь выехать за город, то можно увидеть нашу Галактику в виде белой полосы, пересекающей небо. Млечный Путь – типичная галактика. В центре, по-видимому, находится огромная чёрная дыра. Звёзд в Галактике около 200 млрд. Размеры Галактики: диаметр – 100 тыс. световых лет, толщина – 3 тыс. световых лет. В галактиках есть нечто (тёмное вещество), которого по массе раза в 4 больше, чем видимой (барионной) материи.

14. Следующий и самый большой объект – Вселенная. Она имеет размер около 14 млрд световых лет. Всего во Вселенной 5 % видимого (барионного) вещества – того, которое поглощает и испускает фотоны; 20 % тёмного вещества (на периферия галактик); 75 % тёмной энергии. Тёмная энергия – это нечто, скорее всего состоящее из частиц, которые отталкиваются друг от друга, поэтому Вселенная расширяется с ускорением. О тёмном веществе и тёмной энергии мы знаем очень мало. Учёные только приступают к их изучению.

Физические явления и их связь с природными объектами

Физические явления происходят, разумеется, с реальными природными и техническими объектами. Рассмотрим несколько примеров.

1. Фотон – *поглощение и излучение света.* Фотоны излучаются: а) заряженными частицами, которые движутся с ускорением (тормозное рентгеновское излучение длиной волны 0,1 нм); б) при переходе атома из возбуждённого состояния в основное или другое возбужденное с меньшей

энергией. Фотоны поглощаются при переходе атома из низколежащего в более высоколежащее состояние.

3. Электрон – *механическое движение* (электронно-лучевая трубка: электрон отклоняется в магнитном поле, и получается изображение). С электронами также связано *поглощение света атомами*. В этом процессе валентный электрон в атоме переходит из основного в возбуждённое состояние. С электронами также связано явление, которое называется *электрическим током*, – их упорядоченное движение в металлах.

5. Свободный нейтрон не является стабильным: он испытывает *бета-минус распад*. При этом вылетают электрон и антинейтрино, и рождается протон, который живёт вечно. Распад нейтрона – это один из видов *радиоактивности*. Этому процессу подвержены все ядра с большим числом нейтронов (нейтрон-избыточные). Если добыть золото с массовым числом 210, то такой изотоп претерпевает бета-минус распад (внутри него один нейтрон превращается в протон), и золото станет ртутью, другим химическим элементом.

6. Многие ядра (например, уран) испытывают *альфа-распад.* В цепочке распадов образуется радон, который является инертным газом; атомы радона диффундируют из твёрдого вещества. Здесь мы сталкиваемся с явлением *диффузии*, которое состоит в том, что в результате хаотического движения выравнивается концентрация примеси. Ядро радиоактивного радона обычно образуется в возбуждённом состоянии, а потом переходит в основное, испуская фотоны с энергией около 100 кэВ (гамма-кванты), которые портят людям клетки.

7. Пример явления, происходящего с атомами (молекулами), – *химические реакции окисления* (молекулы кислорода очень химически активны), а также *реакции восстановления*. Для понимания свойств атомов нужно знать, что электроны в атомах располагаются в виде оболочек. Замкнутыми оболочками обладают атомы инертных газов (последняя группа в Периодической таблице). Начинается каждая оболочка с одного s-электрона, это щелочные металлы (первая группа Периодической таблицы),

у которых внешний электрон слабо связан с остальной частью атома. Наконец, у галогенов (предпоследняя группа) до замкнутой оболочки не хватает одного электрона. Такие атомы очень легко присоединяют электрон и образуют отрицательный однозарядный атомарный ион.

Физические законы

Основные законы физики – законы сохранения энергии, импульса и момента импульса. Эти законы являются основными, потому что они самые точные, справедливы для реальных процессов везде и всегда, никто и никогда не наблюдал нарушения этих законов, отклонения от них. Эти законы, которые формулируются и изучаются в классической механике, являются основными законами физики и естествознания вообще. Они выполняются даже тогда, когда соотношения, из которых они «выводятся», уже несправедливы. К основным законам естествознания относится также закон сохранения электрического заряда.

Большинство законов физики есть законы приближённые. Например, законы классической механики (законы Ньютона) применимы лишь до тех пор, пока скорости, с которыми движутся частицы, намного меньше скорости света. Если частицы имеют очень маленькие массы или движутся в очень маленькой области пространства, на смену классической механике приходит квантовая. Тогда для описания движения частицы используется уравнение Шрёдингера, которое намного сложнее законов Ньютона.

Классическая механика, однако, составляет основу физики, поэтому её изучению обычно посвящают много времени. Некоторые считают, что классическая механика оперирует только макроскопическими объектами, такими как балки, моторы, рычаги и лопаты. Это заблуждение! Исследование столкновения двух атомных ядер начинается с оценки потенциального барьера между ними (потенциальный барьер – одно из основных понятий механики), а ведь размеры ядер порядка 10^{-14} м!

Физические величины [15]

Физика оперирует физическими величинами (ФВ), которые измеряют или вычисляют. На нашем уровне удобно все величины поделить на три ти-

па: скалярные, алгебраические и векторные. В большинстве учебников алгебраические величины не выделяют, зато оперируют понятием алгебраической суммы. В квантовой механике появляются ещё комплексные ФВ.

Самые простые величины – скалярные. Они характеризуются одним числом и всегда положительны. К алгебраическим величинам удобно отнести такие, которые характеризуются тоже одним числом, но могут принимать положительные и отрицательные значения.

Наконец, самые сложные величины – векторные. К векторным величинам относятся такие, которые имеют направление и складываются по правилу параллелограмма. Векторы характеризуются не одним числом, а тремя – так называемыми компонентами, или проекциями на оси. Эти проекции являются алгебраическими величинами. Когда составляется и решается уравнение, то векторная величина должна быть равна только векторной, скалярная – скалярной, а алгебраическая – алгебраической. Нарушение этого правила – серьёзная ошибка, которая, к сожалению, встречается очень часто.

Обратите внимание, что формула

$$\vec{a} = \vec{b} + \vec{c}$$

означает только то, что $a_x = b_x + c_x$, $a_y = b_y + c_y$, $a_z = b_z + c_z$.

Постарайтесь твёрдо выучить определения основных физических величин. Этих определений довольно много. Однако без системы определений мы никогда не будем понимать друг друга. Большинство физических величин определяется через более простые. Например, определение импульса частицы выражается формулой $\vec{p} = m\vec{\mathrm{v}}$, где m – масса частицы, а $\vec{\mathrm{v}}$ – её скорость. Иногда в учебниках векторные величины выделяют не стрелкой сверху, а жирным шрифтом.

При знакомстве с новой физической величиной полезно составить её сравнительную характеристику с другой хорошо известной ФВ. Приведём пример минимальной сравнительной характеристики волновой функции (см. раздел 12) и скорости частицы (табл. 2.1).

Таблица 2.1

Пример сравнительной характеристики двух физических величин

Признак	Волновая функция	Скорость частицы
Что это?	комплексная ФВ	векторная ФВ
Обозначение	Ψ	$\vec{v}$
Единица измерения	зависит от задачи	м/сек
Определение	отсутствует	$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$
Применение	$\rho_П = \lvert\Psi\rvert^2$	$\vec{p} = m\vec{v}$

Можно сравнивать не два объекта, а три или четыре: главное, чтобы эти объекты относились к одной категории.

Размерности физических величин

Почти каждую ФВ можно измерить прямо или косвенно. Для этого используется какая-нибудь единица измерения. Единицы измерения ФВ в Международной системе единиц (СИ) тоже необходимо знать или уметь получать.

Задания для самостоятельного выполнения

2.1. Составьте сравнительную характеристику массы частицы и её кинетической энергии.

2.2. Составьте сравнительную характеристику двух физических явлений: теплопроводности и электропроводности.

2.3. Вычислите длину волны электромагнитного излучения, фотон которого имеет массу, равную массе электрона.

3. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ

При изучении естествознания вообще и физики в частности решение задач играет важную роль. Решение задачи – всегда творческий процесс, поэтому дать рецепт, который всегда приводил бы к успеху при решении задачи, невозможно. Кое-какие советы, однако, могут принести пользу.

Приступая к решению задачи, начинайте не с поиска подходящей формулы, а разберитесь, о каком **физическом явлении** идёт речь в задаче.

Полезно открыть чистый разворот тетради и переписать условие задачи полностью, без сокращений. Дело в том, что иногда одно слово является ключевым и, если оно потеряно (или вы не обратили на него внимания), задача меняет смысл.

Затем целесообразно сделать **рисунок** (или несколько рисунков), если это возможно. В это время выбирается **модель**. Например, если речь идёт о летящем далеко от нас самолёте, его целесообразно считать частицей (материальной точкой). А если речь идёт о шкафе, который надо передвинуть в комнате, его нужно считать абсолютно твёрдым телом.

Полезно оптимизировать выбор направления осей координат и начала отсчёта. Объём выкладок при решении одной и той же задачи может значительно различаться в зависимости от того, насколько удачен этот выбор.

Успешное решение задачи зависит от того, насколько удачно вы введёте **буквенные обозначения** для ФВ. Обозначения вводятся именно тогда, когда вы чертите рисунок. Параллельно составляется **краткое условие**, в котором фигурируют эти обозначения. После того как обозначения введены, менять их нельзя. Разумеется, **искомая величина** тоже должна быть как-то обозначена. Только тогда ясно, что же мы ищем в задаче.

Обдумывая задачу, попытайтесь предугадать ответ (дать **грубую оценку** искомой величины или разумного диапазона её значений). Это поможет избежать ошибок, которые студенты часто делают при расчетах на калькуляторах. Часто получить грубую оценку для результата можно из соображений размерности и здравого смысла.

Для начала попробуйте написать хоть какую-нибудь формулу, в которую входит **искомая величина** и хотя бы некоторые из данных задачи. Если не видно, куда двигаться дальше, попробуйте выразить искомую величину другим образом, например через её **определение**.

Часто решить сложную задачу сразу не удаётся. Тогда попытайтесь разбить её на несколько маленьких, простых, таких, которые вы решаете легко, которые вас не пугают. Эта «разбивка», **«примитивизация»** – очень важный приём, который использует любой человек при решении любой сложной многоходовой задачи.

Для решения задачи часто полезно **выбрать одно тело**, для которого вы потом будете записывать закон сохранения энергии или 2-й закон Ньютона. Часто один и тот же закон, одну и ту же формулу нужно использовать несколько раз для разных состояний или разных тел. Состояния и тела лучше отмечать индексами. Например: $\vec{v}_{1a}$ – скорость тела «a» в состоянии «1».

Для успешного решения задачи полезно разобраться в том, какие величины **изменяются** при переходе системы из одного состояния в другое, а какие **остаются неизменными**. Иногда установить неизменные величины помогают **законы сохранения**.

Конечно, прежде чем перейти к вычислениям, задачу следует решить в **общем виде**, т. е. получить одну расчётную формулу (или несколько, если одна получается слишком громоздкой). В любом случае в каждой формуле размерности и типы всех слагаемых должны быть одинаковы. **Неравенство размерностей** или несовпадение типов – верный признак ошибки в алгебраических выкладках.

В большинстве случаев задача считается решённой, когда вы получили численное значение искомой величины. Обычно оно должно быть получено с **тремя значащими цифрами** или, как говорят физики, знаками. Например, число 1,25 содержит 3 знака. Это же число можно записать в виде $0{,}0125 \cdot 10^2$ или $125 \cdot 10^{-2}$. Число знаков при этом не меняется. Число 9,60 тоже содержит 3 знака: нуль на конце несёт в себе информацию о точности, с которой мы знаем данную величину. Ответ следует записывать в стандартном виде: три цифры (первая – не нуль), порядок, размерность. Из трёх вариантов записи

числа $b = 2{,}40 \cdot 10^4$ м, $b = 24{,}0 \cdot 10^3$ м и $b = 0{,}24 \cdot 10^5$ м только первый является стандартным.

Если задача решена, а место на развороте осталось, начните следующую задачу с нового разворота, не экономьте бумагу: это самое дешёвое из того, что вы тратите. Зато если задача решена неверно (или если предлагается найти в ней ещё какие-нибудь величины), можно будет продолжить её решение тут же, а не через 5 страниц.

Вычисления в физике

Научный калькулятор (т. е. имеющий на клавиатуре значки sin, cos, ln, x^y) будет вам чрезвычайно полезен. Приобретя его или загрузив соответствующее приложение в свой смартфон, ознакомьтесь с элементарными функциями, попытайтесь построить их графики. Очень полезно представлять себе качественно, как выглядит график той или иной функции. Обратите внимание на то, что аргумент любой тригонометрической функции может быть выражен в радианах (rad), градусах (deg) или градах (grad). Угол, под которым видна дуга длиной в четверть окружности из центра этой окружности, составляет $\pi/2$ (рад), 90°, 100 град.

Часто вычисления можно проделать в уме и получить правильный результат с двумя значащими цифрами. В этом вам помогут следующие приближённые формулы:

$$\ln(1+\alpha) \approx \alpha; \tag{3.1}$$

$$\sin\alpha \approx \alpha; \tag{3.2}$$

$$\cos\alpha \approx 1 - \alpha^2/2\,; \tag{3.3}$$

$$e^{\alpha} \approx 1 + \alpha; \tag{3.4}$$

$$(1+\alpha)^{\gamma} \approx 1 + \gamma\alpha, \tag{3.5}$$

которые справедливы при $|\alpha| \ll 1$. Аргумент синуса и косинуса при этом обязательно должен быть выражен в радианах.

Ваши успехи будут тем большими, чем чаще и упорнее вы будете выполнять домашнее задание. Вообще человека сложным вещам научить нельзя, он им может научиться только сам. В ходе такого самообучения (будь то чтение учебника, конспекта лекций или попытка решить задачу) неизбежно возникают вопросы. Вот тут-то и нужен преподаватель! Именно в нашей дискуссии, в обсуждении возникших вопросов и образуются наши знания и наше понимание. Поэтому старайтесь приходить на занятия со сформулированными вопросами. А если вопросов нет и все задачи решены верно, это тоже замечательно.

К несчастью, в вузах до сих пор сохранилась такая форма занятий, как чтение лекций. Наверное, в XV веке, когда книги были недоступны, а профессор был бесценным сосудом знаний, имело смысл записывать слово в слово всё, что он излагает. При этом о понимании речь не шла: главное – успеть записать. В XXI веке почти всё можно прочитать в книгах или на электронных носителях. Если вы будете читать материал каждого занятия заранее, перед занятием, наша работа станет намного эффективнее: при повторном «проходе» по материалу уже возникает некоторое (пусть неполное) его понимание.

Задания для самостоятельного выполнения

3.1. Как и на сколько процентов отличаются значения $\ln\gamma$ при $\gamma = 1{,}21$, вычисленные с помощью калькулятора и по приближённой формуле?

3.2. Как и на сколько отличаются значения $\gamma^{0.65}$ при $\gamma = 1{,}18$, вычисленные с помощью калькулятора и по приближённой формуле?

3.3. Каков геометрический смысл формулы (3.2)?

3.4. Получите формулу (3.3) из формулы (3.2), (3.5) и основного тригонометрического тождества.

4. ГРАФИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ОДНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ

За время развития современной науки, т. е. за последние 400 лет, открыто около десятка основных законов, которые остаются справедливыми и в классической, и в квантовой механике. Это, в первую очередь, законы сохранения энергии, импульса и момента импульса. Все эти три закона формулируются сходным образом: энергия (или импульс, или момент импульса) замкнутой системы остаётся неизменной с течением времени.

Движение одной частицы очень удобно анализировать с помощью закона сохранения механической энергии (сумма кинетической и потенциальной энергий остаётся постоянной в консервативной системе) и графика зависимости потенциальной энергии (ПЭ) от координаты $W_p(x)$. Такой график лежит в основе не только классического, но и квантового анализа движения частицы. Пример зависимости ПЭ от координаты приведен на рис. 4.1.

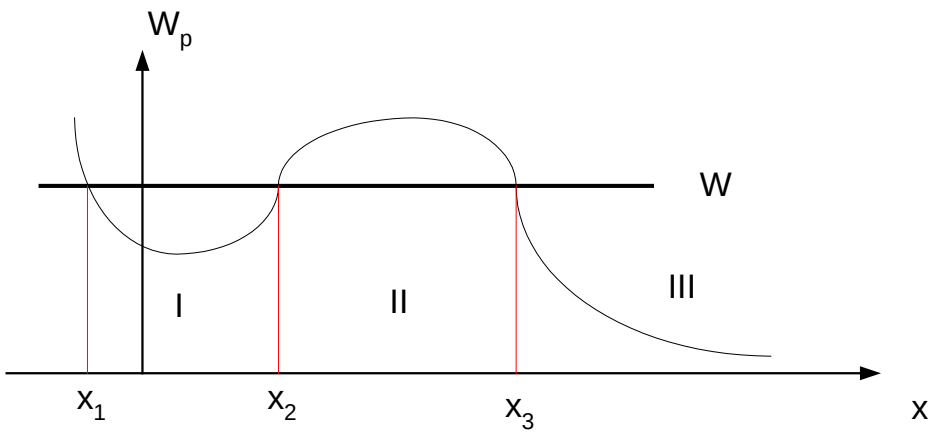

Рис. 4.1. Типичная зависимость потенциальной энергии W_p от (обобщённой) координаты x

Потенциальная энергия не может быть больше полной механической W (горизонтальная линия), потому что кинетическая энергия всегда положительна. Это простенькое соображение сразу позволяет выявить на оси x области, доступные для движения частицы при данном значении W. Это области I и III. В области I частица совершает финитное периодическое движение (движется в ограниченной области пространства). В точках x_1 и x_2

её скорость обращается в нуль, поэтому эти точки называются точками остановки (точками поворота). Саму область I часто называют потенциальной ямой в соответствии с её внешним видом. Области I и III разделены потенциальным барьером II, через который классическая частица при данном значении полной энергии пройти не может. Если начальное значение координаты частицы превосходит x_3, частица совершает инфинитное движение (т. е. её движение не ограничено справа). При $\mathrm{v}_{x0} > 0$ частица удаляется от точки x_3, при $\mathrm{v}_{x0} < 0$ частица движется в направлении барьера, ударяется об него и затем уходит на бесконечность.

Задания для самостоятельного выполнения

4.1. Частица находится в поле с потенциальной энергией, представленной на рис. 4.1. Что можно сказать про её движение, если известно, что её координата удовлетворяет условию $x > x_3$; $x_1 < x < x_2$; $x < x_1$?

4.2. Тело массой 3,5 кг брошено вертикально вверх с начальной скоростью 4,5 м/сек. На какой высоте его кинетическая энергия будет равна половине потенциальной? Сопротивление воздуха не учитывать.

4.3. С какой высоты надо сбросить литр воды, чтобы в результате удара о поверхность земли вода закипела? Начальная температура воды $+20\ ^{\circ}\mathrm{C}$. Трением о воздух пренебречь. Будем считать, что на нагрев воды идёт 60 % её кинетической энергии перед ударом.

4.4. Ядро свинца-208, имеющее кинетическую энергию 21 МэВ, налетает на покоящееся ядро азота-16, и происходит абсолютно упругое соударение. Какую скорость приобретёт ядро азота после удара?

4.5. Молекула углекислого газа с энергией, вдвое превышающей среднюю энергию хаотического теплового движения, налетает на покоящуюся молекулу азота. Происходит абсолютно упругий центральный удар. С какой скоростью движется молекула азота после удара?

5. ВЕЩЕСТВО (БАРИОННАЯ МАТЕРИЯ)

Совсем недавно, вплоть до 1980-х гг., считалось, что весь материальный мир, который окружает нас, состоит из вещества и излучения. Будем называть веществом такой вид материи, который состоит из частиц, имеющих ненулевую массу покоя и участвующих в электромагнитном взаимодействии (барионная материя). Мельчайшими частицами вещества, сохраняющими его свойства, являются молекулы. Из молекул состоят вода и лёд, угарный газ, азот при нормальных условиях, песок. Структурными элементами молекул являются атомы. В 2020 г. было известно 118 атомов различных элементов. В центре любого атома находится положительно заряженное ядро, в котором сосредоточена почти вся масса атома. Размеры ядра (его радиус) порядка $5\ \text{фм} = 5 \cdot 10^{-15}$ м. Вблизи ядра по орбиталям движутся лёгкие отрицательно заряженные частицы – электроны. Размеры всех атомов приблизительно одинаковы: радиус атома порядка $0{,}1\ \text{нм} = 10^{-10}$ м. Число электронов в атоме равно зарядовому числу, обозначаемому буквой Z. Суммарный электрический заряд всех электронов по модулю равен заряду ядра. Таким образом, атом в целом нейтрален [16].

В природе и технике часто происходит явление ионизации. Оно заключается в том, что от атома или молекулы отрывается (или добавляется) один или несколько электронов. Если от атома или молекулы оторвать один электрон, получается однозарядный положительный ион. Процесс ионизации происходит, например, за счёт космического излучения и радиоактивного распада.

Концентрация ионов в окружающем нас воздухе невелика по сравнению с концентрацией нейтральных атомов (молекул). В воздухе электроны, которые оторвались от своих атомов (молекул), сейчас же «прилипают» к другим молекулам (например, к молекулам кислорода O_2). Так образуются однозарядные отрицательные молекулярные ионы. Однозарядные отрицательные атомарные ионы легко образуются из атомов фтора,

хлора и других галогенов. Однозарядные положительные атомарные ионы легко образуются из атомов лития, натрия и других щелочных металлов.

Структурными элементами атомных ядер являются нейтроны и протоны, которые называют общим словом нуклоны. Например, если в роли тела выступает ядро бериллия ^{10}Be, то в роли частиц – его структурных элементов – выступают 4 протона ($Z = 4$, зарядовое число) и 6 нейтронов ($N = 6$, число нейтронов). Всего в ядре бериллия 10 нуклонов ($A = 10$, массовое число). Разумеется,

$$A = Z + N. \tag{5.1}$$

Ядра атомов одного и того же химического элемента содержат одно и то же число протонов, но обычно разное число нейтронов. Такие атомы и их ядра называются изотопами. Изотопы почти невозможно отличить по их химическим свойствам. Например, уран встречается в природе в виде двух изотопов: с числом нуклонов 238 (так и говорят, уран-238) и с числом нуклонов 235 (уран-235). Очень небольшое число элементов встречается в природе в виде одного изотопа (например, золото и натрий).

При решении наших задач все ядра можно считать сферическими. Радиус ядра вычисляется по формуле (2.3).

Свойства ядер в большой степени обусловлены свойствами нуклонов. Протон и нейтрон обладают сходными свойствами: если бы протон не был заряжен, они вообще были бы неотличимы. Оба они имеют спин $1/2$ и являются фермионами. Их массы почти одинаковы и равны примерно $1{,}67 \cdot 10^{-27}$ кг.

С любой частицей связан волновой вероятностный процесс. Характеристики волны, отвечающей этому процессу, связаны с корпускулярными характеристиками соответствующих частиц. Основные характеристики волны – это её длина λ и период τ. С ними связаны основные корпуску-

лярные характеристики частицы: импульс p и энергия W. Эта связь выражается формулами:

$$p = 2\pi\hbar/\lambda; \tag{5.2}$$

$$W = 2\pi\hbar/\tau, \tag{5.3}$$

где $\hbar = h/(2\pi)$, $\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-34}$ Дж·сек. Впервые формулы (5.2) и (5.3) были получены для фотонов Максом Планком в 1900 г. Для частиц вещества эти формулы впервые использовал Луи де Бройль в 1925 г. Поэтому если формула (5.2) записана для частицы вещества, то входящую в неё длину волны называют дебройлевской.

Формулы (5.2) и (5.3) применимы как к веществу, так и к излучению. Однако связь импульса с энергией для частиц вещества и излучения различна. Для частиц вещества, движущихся со скоростью много меньше скорости света, она имеет вид

$$W = p^2/(2m_0). \tag{5.4}$$

Волны, соответствующие движущимся частицам вещества, называются волнами де Бройля (или дебройлевскими). Однако микрочастицу нельзя считать ни частицей, ни волной в классическом понимании. Микрочастица может проявлять себя либо как волна, либо как частица: это зависит от внешних условий [16].

Если микрочастица сталкивается с какой-либо преградой и размер преграды соизмерим с дебройлевской длиной волны, то частица проявляет свои квантовые (волновые) свойства: возникает явление дифракции. Если дебройлевская длина волны много меньше размера препятствия, то частица ведет себя привычным классическим образом, двигаясь по траектории, которая определяется вторым законом Ньютона.

Многие расчеты в квантовой физике можно значительно упростить, если использовать соотношение $\hbar c = 197$ эВ · нм $= 197$ МэВ · фм, а также знать, что $m_e c^2 = 511$ кэВ, $m_p c^2 = 940$ МэВ и e(Кл)U(В) $= W$(эВ).

Пример 5.1. Найти дебройлевскую длину волны альфа-частицы, прошедшей ускоряющую разность потенциалов 1,04 кВ [4].

Дано:
$U = 1{,}04$ кВ;
$q = 2e = 3{,}2 \cdot 10^{-19}$ Кл;
$m = 4m_p = 6{,}68 \cdot 10^{-27}$ кг.

λ–?

Решение. Альфа-частица представляет собой ядро атома гелия: массовое число $A = 4$, зарядовое число $Z = 2$. Таким образом, масса и заряд частицы известны.

Пройдя ускоряющую разность потенциалов U, по закону сохранения энергии альфа-частица приобретет кинетическую энергию

$$W_k = qU. \tag{5.5}$$

Выразив импульс альфа-частицы из уравнения (5.4) как

$$p = \sqrt{2mW_k} \tag{5.6}$$

и подставив его в уравнение (5.2), получим дебройлевскую длину волны альфа-частицы:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mW_k}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mqU}}; \tag{5.7}$$

$$\lambda = \frac{2\pi \cdot 1{,}054 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 6{,}68 \cdot 10^{-27} \cdot 3{,}2 \cdot 10^{-19} \cdot 1{,}04 \cdot 10^{3}}} = 3{,}14 \cdot 10^{-13} \text{ м}.$$

Этот расчет можно значительно упростить. Для этого надо использовать соотношение $\hbar c = 197$ МэВ · фм, а также знать, что $m_p c^2 = 940$ МэВ.

Уножая числитель и знаменатель формулы (5.7) на c, получаем:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{\sqrt{2 \cdot 4m_p c^2 \cdot qU}} = \frac{2\pi \cdot 197}{\sqrt{2 \cdot 4 \cdot 940 \cdot 2 \cdot 1{,}04 \cdot 10^{-3}}} = 3{,}13 \ \cdot 10^2 \text{ фм.}$$

Задания для самостоятельного выполнения

5.1. Нарисуйте график зависимости длины волны от энергии частицы для фотона и для электрона.

5.2. Сколько электронов в атоме хрома?

5.3. Сколько электронов в двухзарядном положительном ионе цинка?

5.4. Сколько электронов в однозарядном отрицательном ионе азота, входящего в состав воздуха?

5.5. Сколько протонов в ядре атома свинца-204?

5.6. Сколько нейтронов в ядре атома висмута-209?

5.7. Как и во сколько раз различаются объёмы атома и ядра меди-30?

5.8. Вычислите кинетическую энергию альфа-частицы (в МэВ), де-бройлевская длина волны которой 150 фм.

5.9. Вычислите дебройлевскую длину волны электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов 25 В.

6. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

Весь материальный мир, который мы видим, состоит из барионного вещества и электромагнитного излучения [16].

Излучением называется такой вид материи, который состоит из частиц, имеющих нулевую массу покоя. В жизни нам приходится сталкиваться только с электромагнитным излучением. Оно состоит из квантов: испускается квантами (порциями), поглощается квантами и распространяется в виде квантов, которые названы фотонами. Фотоны напоминают обычные части-

цы, например электроны. Как и электрон, фотон обладает энергией $W_Ф$, импульсом $\vec{p}_Ф$ и собственным моментом импульса (спином) $\vec{L}_{SФ}$.

Мы помним, что с любой частицей связан волновой вероятностный процесс. Характеристики соответствующей волны связаны с корпускулярными характеристиками частиц. Основные характеристики волны – это её длина λ и период τ. С ними связаны основные корпускулярные характеристики частицы. Связь эта выражается формулами (5.2) и (5.3).

Однако связь импульса фотона с его энергией выражается формулой

$$W_ф = p_ф c. \tag{6.1}$$

В отличие от многих привычных нам частиц (электронов, альфа-частиц, нейтронов) фотон не имеет массы покоя и движется всё время с одной и той же скоростью $c = 2{,}998 \cdot 10^8$ м/сек относительно любой инерциальной системы отсчёта. Это свойство фотонов, противоречащее нашему житейскому опыту, твёрдо установлено во многих экспериментах более 100 лет назад.

Как и микрочастицы вещества, в зависимости от внешних условий фотон может проявлять себя либо как волна (испытывать дифракцию), либо как частица. В последнем случае длина волны этого фотона должна быть достаточно мала.

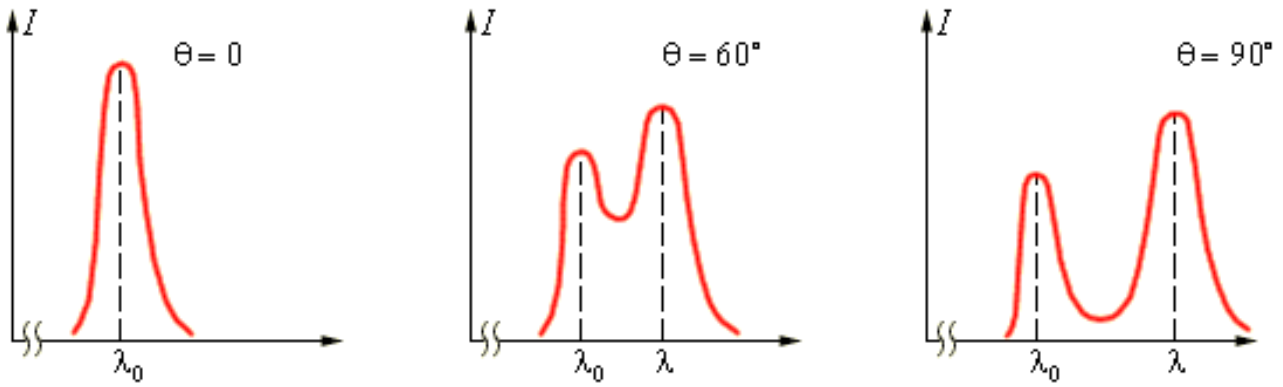

Рис. 6.1. Спектр рассеянного излучения для нескольких углов

Остановимся подробнее на упругом рассеянии коротковолнового излучения на электронах, которое называется эффектом Комптона. Это явление

состоит в том, что в спектре коротковолнового (гамма- или рентгеновского) электромагнитного излучения, рассеянного на веществе, появляется дополнительный максимум (см. рис. 6.1). Этот максимум сдвинут в сторону больших длин волн (λ_1) по отношению к длине волны исходного излучения λ_0 [4, 12].

Сдвиг длины волны связан с углом θ, под которым наблюдается данный максимум, формулой

$$\lambda_1 - \lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_e c}(1 - \cos\theta). \tag{6.2}$$

Множитель с размерностью длины волны в правой части называется комптоновской длиной волны для электрона и обозначается λ_e. Из формулы (6.2) видно, что в направлении падающего излучения ($\theta = 0$) сдвига длины волны вообще нет. Наибольший сдвиг длины волны имеет место для излучения назад ($\theta = 180°$), он составляет $2\lambda_e$.

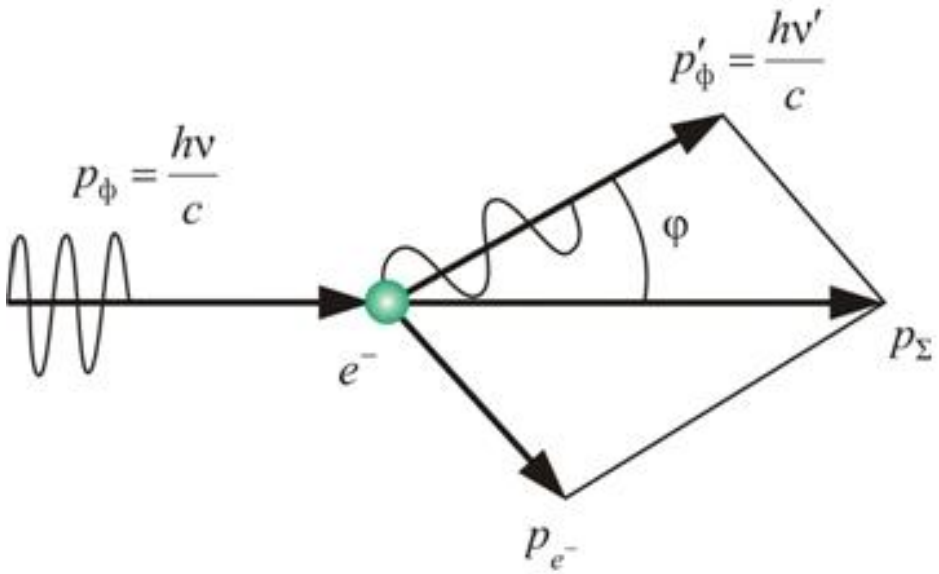

Рис. 6.2. Импульсная диаграмма,
иллюстрирующая эффект Комптона

В таком процессе фотон сталкивается с электроном и отдает ему часть своей энергии и импульса (рис. 6.2). Чтобы получить формулу (6.2), надо пользоваться законами сохранения энергии и импульса, при этом для энергий следует применять релятивистские соотношения:

$$W_e = c\sqrt{p_e^2 + m_e^2c^2}, W_ф = cp_ф. \quad (6.3)$$

Эффект Комптона ярко проявляется в основном на веществах, содержащих атомы со слабо связанными электронами. Тогда электроны можно рассматривать как свободные, пренебрегая их энергией связи в атоме.

Именно комптоновское рассеяние ответственно за поражающее живые существа действие радиоактивного гамма-излучения: электроны вырываются из своих химических связей, а молекулы либо распадаются, либо превращаются совсем в другие молекулы, которые жизни уже не способствуют.

Квантовые свойства излучения проявляются также в обрывании тормозных рентгеновских спектров. Это явление состоит в том, что при торможении заряженной частицы спектр её излучения не содержит длин волн меньше некой минимальной. Эта минимальная длина волны определяется тем, что при торможении вся энергия заряженной частицы переходит в энергию одного-единственного фотона.

Задания для самостоятельного выполнения

6.1. Фотон с энергией 1,75 кэВ рассеивается на электроне на угол 30°. Какова длина волны рассеянного фотона?

6.2. Альфа-частица при торможении может испустить максимум четыре фотона с длиной волны 200 нм. Какова скорость α-частицы?

6.3. Докажите, что свободный электрон не может излучить один фотон.

6.4. Нарисуйте график зависимости длины волны от энергии частицы для фотона.

6.5. Если в роли тела выступает электромагнитное излучение с энергией 350 мДж и длиной волны 400 нм, то из скольких частиц оно состоит?

6.6. Электромагнитное излучение из предыдущей задачи падает по нормали на алюминиевую пластинку площадью 23 см^2 и толщиной 17 мкм и отражается от неё. С какой силой действует излучение на пластинку?

7. ОТЛИЧИЕ КВАНТОВОГО ОПИСАНИЯ ОТ КЛАССИЧЕСКОГО

В классической физике состояние частицы характеризуется координатой (радиус-вектором) и импульсом, которые зависят от времени. Эти зависимости можно найти, решая дифференциальные уравнения, которые соответствуют второму закону Ньютона. Такое описание называется детерминистическим: если мы нашли временные зависимости координаты и импульса, мы точно знаем, где окажется частица в любой момент времени.

В квантовой механике на смену детерминистическому приходит вероятностное описание [6, 7, 12]. Максимум, что мы можем знать о движении частицы, это вероятность, с которой она находится в той или иной области пространства. В школьном курсе химии области пространства, в которых электрон в атоме находится с вероятностью 90 %, называются орбиталями (НЕ орбитами!). Решая основное дифференциальное уравнение квантовой механики – уравнение Шрёдингера, мы можем найти плотность вероятности. Это скалярная физическая величина, определение которой зависит от размерности задачи. Если задача трёхмерная, мы имеем дело с объёмной плотностью вероятности, определение которой выражается формулой

$$\rho_{\Pi V}(x, y, z, t) = \frac{d\Pi}{dV}. \tag{7.1}$$

Аналогично для двумерной задачи можно ввести поверхностную плотность вероятности

$$\rho_{\Pi S}(x, y, t) = \frac{d\Pi}{dS}. \tag{7.2}$$

Наконец, одномерной задаче соответствует линейная плотность вероятности

$$\rho_{\Pi}(x, t) = \frac{d\Pi}{dx}. \tag{7.3}$$

Любая плотность вероятности должна удовлетворять условию нормировки. Для одномерного случая оно имеет вид

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{\Pi}(x,t)dx. \tag{7.4}$$

С помощью формулы (7.3) можно найти вероятность того, что частица в данный момент времени находится где-то между x_1 и x_2:

$$\Pi_{12}(t) = \int_{x_1}^{x_2} \rho_{\Pi}(x,t)dx. \tag{7.5}$$

Среднее значение любой функции от x вычисляется по формуле

$$\langle f(x)\rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, \rho_{\Pi}(x,t)dx. \tag{7.6}$$

Задания для самостоятельного выполнения

7.1. Пусть линейная плотность вероятности имеет вид перевернутой параболы, которая упирается в ось x в точках 20 см и 45 см. Определите вероятность того, что частица находится между точками 21 см и 24 см.

7.2. Определите среднее значение координаты частицы из предыдущего задания.

7.3. Определите среднеквадратичное отклонение координаты частицы от среднего значения из предыдущего задания.

7.4. Напишите формулы, выражающие собой условия нормировки для двумерной и трёхмерной плотностей вероятности.

7.5. Напишите формулу, выражающую собой среднее значение функции $f(x,y,z)$, используя трёхмерную (объёмную) плотность вероятности.

8. КВАНТОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ ФИНИТНОГО ДВИЖЕНИЯ

В природе и технике часто приходится сталкиваться с ситуацией, когда движение частицы (системы) ограничено (финитно). Финитное движение совершают электроны в атомах, атомы в молекулах, ионы вблизи узлов кристаллической решетки. Понятно, что электроны, молекулы и атомы движутся в реальном трёхмерном пространстве. Мы, однако, будем рассматривать в основном одномерное движение вдоль оси x (это наглядно и соответствует нашим математическим возможностям).

С квантовой частицей, совершающей финитное движение, происходит то же, что с волной в резонаторе: волна становится стоячей. Для частицы это стоячая волна вероятности (стоячая волна де Бройля). В соответствии с условием образования стоячей волны (см. задание 1.6) и формулой (5.2) импульс частицы и её энергия квантуются, т. е. принимают не какие угодно, а строго определённые значения. Эти значения нумеруются с помощью главного квантового числа $n = 0, 1, 2, \ldots$ Состояние с $n = 0$ называется основным, а остальные – возбуждёнными. Уравнение стоячей волны де Бройля имеет вид

$$\Psi_n(x,t) = \Phi_{\mathrm{n}}(x)\exp\left(-\frac{iW_n t}{\hbar}\right). \tag{8.1}$$

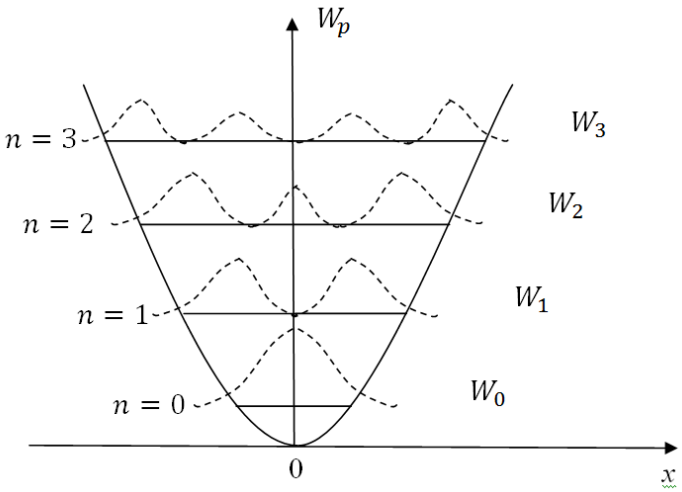

Рис. 8.1. Плотности вероятностей и уровни энергии для гармонического осциллятора

Конкретный вид функций $\Phi_{\mathrm{n}}(x)$ (стационарных волновых функций) и $W_n(n)$ зависит от вида потенциальной энергии поля, в котором движется частица. На качественном уровне квадраты модулей стационарных волновых функций выглядят так, как это показано на рис. 8.1. Эти квадраты модулей представляют собой плотности вероятностей (см. раздел 12).

Приближённая общая формула, по которой можно оценить энергии уровней в поле вида

$$W_p(x) = W_{p0}\,|x/b|^{\gamma}, \tag{8.2}$$

где W_{p0}, b и γ – некоторые постоянные, имеет вид

$$W_n = \left[\frac{\pi\hbar(n+1)}{2b\sqrt{2m}}\right]^{\frac{2\gamma}{2+\gamma}} W_{p0}^{\frac{2}{2+\gamma}} \left(\frac{2+\gamma}{\gamma}\right)^{\frac{\gamma}{2+\gamma}}. \tag{8.3}$$

Задания для самостоятельного выполнения

8.1. Постройте графики зависимости $W_p(x/b)$ для $\gamma = 1, 2, 4, 6$ на одних осях.

8.2. Из формулы (8.3) получите приближённую формулу для уровней энергии частицы при $\gamma \gg 1$. Какому стандартному случаю, рассматриваемому во всех учебниках по квантовой механике, это соответствует?

8.3. Из формулы (8.3) получите приближённую формулу для уровней энергии гармонического осциллятора (ГО).

8.4. Из формулы (8.3) получите приближённую формулу для уровней энергии частицы, которая падает в поле силы тяжести и отражается от абсолютно упругой горизонтальной плоскости.

8.5. Эксперимент, описанный в предыдущей задаче, был осуществлён в 2002 г. для нейтрона [17]. Оцените энергию основного состояния нейтрона.

8.6. Какие качественные выводы о связи между $W_p(x/b)$ для разных γ с энергетическим спектром частицы в соответствующей яме можно сделать?

9. СООТНОШЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Классическая частица (материальная точка, например электрон) движется по некоторой траектории. Тогда можно одновременно и сколь угодно точно определить её координаты и импульс. Иными словами, погрешность определения координаты x (Δx) и погрешность определения проекции импульса на ось x (Δp_x) можно всегда сделать сколь угодно малыми [4, 12].

Однако в природе частицы вещества могут проявлять как корпускулярные, так и волновые свойства. Это значит, что в последнем случае уже нельзя говорить о траектории, по которой движется частица. Описание движения частицы с помощью координат и скорости (импульса) будет тем более точным, чем больше масса частицы.

В то же время любой эксперимент, дающий информацию о микрочастице, является макроскопическим: о движении протона, например, судят по тому, в какой сектор полупроводникового детектора он попадёт. Поэтому при описании микрообъектов неизбежно приходится использовать классические понятия.

Степень пригодности этих понятий определяется так называемыми соотношениями неопределенностей Гейзенберга. Эти соотношения, по существу, представляют собой физические законы, которые утверждают, что микрочастица не может иметь одновременно и определенную координату (x, y, z), и соответствующую этой координате определенную проекцию импульса (p_x, p_y, p_z). Неопределенности этих величин удовлетворяют следующим неравенствам:

$$\Delta x \Delta p_x \geq 2\pi\hbar; \tag{9.1}$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq 2\pi\hbar; \tag{9.2}$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq 2\pi\hbar. \tag{9.3}$$

Эти соотношения показывают, в частности, что квантовая частица принципиально не может покоиться. Как тут не вспомнить вторую базовую идею физики, в которой говорится об имманентном частицам хаотическом движении!

В соответствии с полной квантовой теорией соотношение неопределенностей имеет место также для энергии W и времени t:

$$\Delta W \Delta t \geq 2\pi\hbar, \tag{9.4}$$

где ΔW – неопределенность значения энергии некоторого состояния системы; Δt – промежуток времени, в течение которого система находится в этом состоянии. Например, если Δt – среднее время жизни ядра в возбужденном состоянии, то ΔW – ширина соответствующего ядерного энергетического уровня.

Задания для самостоятельного выполнения

9.1. Радиус атома имеет порядок величины 0,10 нм. Оцените, с какой скоростью движется электрон в атоме.

9.2. Оцените скорость, с которой движется протон в ядре урана-238.

9.3. Оцените неопределенность скорости для алюминиевой пылинки диаметром 2,6 мкм, если её координата определена с погрешностью 18 нм.

9.4. Предположим, что электрон в однозарядном положительном атомарном ионе гелия обращается вокруг ядра по круговой орбите радиусом 70 пм. Используя законы классической физики, найдите скорость электрона.

9.5. Предположим, что значение скорости электрона из предыдущей задачи определено с погрешностью в 3 %. Найдите соответствующую неопределенность координаты электрона.

10. ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

На нашем уровне удобно выделять четыре фундаментальных взаимодействия: гравитационное, электромагнитное, слабое ядерное и сильное ядерное (СиЯВ). Слова «слабое» и «сильное» являются терминами, а не просто эпитетами.

Сравнительная характеристика четырех фундаментальных взаимодействий приведена в табл. 10.1.

Таблица 10.1

Фундаментальные взаимодействия и их свойства

Взаимодействие (i)	Гравитационное (g)	Электромагнитное (e)	Сильное ядерное (s)	Слабое ядерное (w)
Радиус r_i	$r_g = \infty$	$r_e = \infty$	$r_s \simeq 10^{-15}$ м	$r_w \simeq 10^{-18}$ м
Частица-переносчик	Гравитон (?)	Фотон	π-мезоны, ρ-мезоны …	W-бозоны, Z-бозон
Масса частицы-переносчика	0	0	$\approx 300\ m_e$	$\approx 80\ m_p$
Энергия взаимодействия	$-G\dfrac{m_1 m_2}{r} \times \exp\left(-\dfrac{r}{r_g}\right)$ (10.1)	$k_e \dfrac{q_1 q_2}{r} \times \exp\left(-\dfrac{r}{r_e}\right)$ (10.2)	$\dfrac{k_s}{r} \times \exp\left(-\dfrac{r}{r_s}\right)$ (10.3)	$\dfrac{k_w}{r} \times \exp\left(-\dfrac{r}{r_w}\right)$ (10.4)
Система	Солнечная, Галактика	Атомы, молекулы	Атомные ядра	–
Характер взаимодействия	Почти всегда притяжение	Притяжение, отталкивание	Притяжение, отталкивание	Отталкивание

В частности, в строке «Система» указаны реальные природные системы, существующие благодаря данному типу взаимодействия. Слабое ядерное взаимодействие имеет исключительно деструктивный характер: за счёт этого взаимодействия происходят все виды бета-распада. Неизвестно ни одной системы, существующей благодаря слабому ядерному взаимодействию.

В 1990-х гг. астрономическими наблюдениями было установлено существование так называемой тёмной энергии. Она проявляет себя в том, что расширение Вселенной (разбегание галактик) происходит с ускорением. Это значит, что гравитационное взаимодействие в таких масштабах имеет характер отталкивания (антигравитация).

На самом деле в рамках современной (с 1980 г.) Стандартной модели (СМ) картина фундаментальных взаимодействий выглядит несколько иначе. А именно, в СМ выделяют лишь три типа фундаментальных взаимодействий: гравитационное, электрослабое и цветное. Электромагнитное и слабое взаимодействия являются, таким образом, проявлениями единого электрослабого взаимодействия. Это нам непривычно, как было непривычно единство электрического и магнитного взаимодействий людям XIX века.

СиЯВ есть «хвостик» цветного взаимодействия, т. е. результат неполной компенсации цветного взаимодействия между кварками. Здесь можно провести аналогию с привычным нам взаимодействием между нейтральными молекулами. Это взаимодействие (электростатическое по природе) возникает из-за неполной компенсации отталкивания ядер и притяжения ядер и электронных оболочек (дипольное взаимодействие).

На переднем крае физики ведутся исследования, призванные объединить электрослабое, цветное и гравитационное взаимодействия в единое целое (теории Великого Объединения).

При моделировании наноструктур (т. е. объектов, состоящих из нескольких сотен атомов) приходится иметь дело почти исключительно с электростатическим взаимодействием.

Взаимодействие нейтральных атомов и молекул, из которых обычно состоят наноструктуры, хорошо описывается потенциалом Леннарда-Джонса (это один человек с двойной фамилией):

$$W_{LJ}(r) = 4W_0\left[\left(\frac{r_a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{r_a}{r}\right)^{6}\right]. \qquad (10.5)$$

В формуле (10.5) r – расстояние между ядрами атомов; r_a – такое значение этого расстояния, при котором энергия взаимодействия атомов обращается в нуль (r_a часто называют радиусом атома); W_0 – глубина потенциала (при $r = 2^{1/6}r_a$ величина $W_{LJ}(r)$ достигает своего минимального значения W_0). Мы видим, что структура потенциала Леннарда-Джонса (в сущности, электростатического) намного сложнее ПЭ взаимодействия двух точечных зарядов.

Что-то в этом роде имеет место и для фемтоструктур – атомных ядер. А именно, сильное ядерное взаимодействие двух нуклонов неплохо описывается формулой

$$W_{M3Y}(r) = \frac{k_{s1}}{(r/r_{s1})}\exp\left(-\frac{r}{r_{s1}}\right) - \frac{k_{s2}}{(r/r_{s2})}\exp\left(-\frac{r}{r_{s2}}\right). \qquad (10.6)$$

В формуле (10.6) коэффициенты $k_{s1} = 11062$ МэВ, $k_{s2} = 2538$ МэВ, $r_{s1} = 0{,}25$ фм, $r_{s2} = 0{,}40$ фм. Индекс $M3Y$ происходит от слов «Мичиган» (штат США, в университете которого сочинили формулу (10.6) и «Юкава» (Yukawa – имя учёного, впервые предложившего формулу (10.3). Видно, что W_{M3Y} представляет собой сумму двух слагаемых типа (10.3). Полезно построить график зависимости $W_{M3Y}(r)$.

Задания для самостоятельного выполнения

10.1. За счёт какого взаимодействия существуют следующие системы: ядро атома урана; атом урана; наша Галактика; молекула воды?

10.2. Как и во сколько раз отличаются по модулю энергии гравитационного и электрического взаимодействия двух протонов? Какие выводы в отношении строения ядра можно отсюда сделать?

10.3. Как и во сколько раз отличаются по модулю энергии гравитационного и электрического взаимодействия протона и электрона? Какие выводы в отношении строения атома можно отсюда сделать?

10.4. Вычислите полную механическую энергию Луны относительно Земли.

10.5. Электроны в двухзарядном положительном атомарном ионе бериллия расположились так, что образовался равносторонний треугольник, в одной из вершин которого находится ядро. Полная кулоновская энергия иона равна -50 эВ. Найдите сторону треугольника.

11. РАДИОАКТИВНОСТЬ

Большая часть известных в настоящее время ядер нестабильна, эти ядра со временем самопроизвольно превращаются в другие ядра. Это явление, точнее, группа явлений называется радиоактивностью. По определению радиоактивность есть способность некоторых ядер спонтанно превращаться в ядра других элементов, испуская при этом частицы. В соответствии с этим определением гамма-распад нельзя считать радиоактивностью: в результате него не образуется ядро другого элемента. Чтобы ознакомиться с явлениями радиоактивности (и вообще с атомными ядрами и их свойствами), рекомендуется пользоваться ресурсом http://nrv.jinr.ru/nrv/webnrv/map/ – это таблица нуклидов (изотопов).

Нам нужно знать четыре наиболее распространённых в природе вида радиоактивности: альфа-распад, бета-минус-распад, бета-плюс-распад и спонтанное деление.

При альфа-распаде материнское ядро испускает альфа-частицу, и в результате получается дочернее ядро с меньшим зарядовым числом и меньшим массовым числом. Общее уравнение альфа-распада имеет вид

$$ {}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{4}_{2}\mathrm{He} + {}^{A-4}_{Z-2}Y. \qquad (11.1) $$

Этому виду радиоактивного распада подвержены ядра с большими значениями зарядового числа $Z > 80$, а основной причиной его является электромагнитное взаимодействие.

При бета-минус-распаде материнское ядро испускает электрон и электронное антинейтрино, в результате получается дочернее ядро с большим зарядовым числом и тем же массовым числом. Общее уравнение бета-минус-распада имеет вид

$$ {}^{A}_{Z}X \rightarrow {}_{Z+1}^{A}Y + {}^{0}_{-1}e^{-} + \tilde{\nu}_{e}. \qquad (11.2) $$

Этому виду радиоактивного распада подвержены ядра с любыми значениями зарядового числа, перегруженные нейтронами, а основной причиной его является слабое ядерное взаимодействие.

Бета-плюс распад очень похож на предыдущий, только испускаются позитрон и электронное нейтрино.

Общее уравнение бета-плюс-распада имеет вид

$$ {}^{A}_{Z}X \rightarrow {}_{Z-1}^{A}Y + {}^{0}_{+1}e^{+} + \nu_{e}. \qquad (11.3) $$

Этому виду радиоактивного распада подвержены нейтрон-дефицитные ядра с любыми значениями зарядового числа, а основной причиной его является слабое ядерное взаимодействие.

Бета-плюс-распаду подобен *K*-захват, когда протон-избыточное ядро захватывает один из электронов *K*-оболочки своего атома. В результате заряд ядра уменьшается на единицу.

К радиоактивности относится также спонтанное деление ядер, при котором нестабильное ядро распадается на два осколка, один из которых имеет зарядовое число около 50–54. Этому виду радиоактивности подвержены ядра с $Z > 100$, а основной причиной его является электромагнитное взаимодействие.

Отдельный нейтрон нестабилен и распадается примерно за 15 мин следующим образом:

$$ {}_{0}^{1}n \rightarrow {}_{1}^{1}p + {}_{-1}^{0}e^{-} + \tilde{\nu}_e. \qquad (11.4) $$

Чтобы понять, по каким правилам записаны уравнения распадов, надо ввести понятие электронного лептонного заряда Λ_e. Его значение равно 1 для электрона и электронного нейтрино ν_e и –1 для позитрона (т. е. антиэлектрона) и электронного антинейтрино $\tilde{\nu}_e$. Итак, уравнение (11.4) удовлетворяет следующим законам сохранения:

1) электрического заряда	Z:	0 =	1 –	1	+	0
2) массового числа (барионного заряда)	A:	1 =	1 +	0	+	0
3) электронного лептонного заряда	Λ_e:	0 =	0 +	1	–	1

$$ n \rightarrow p + e^{-} + \tilde{\nu}_e $$

В любом радиоактивном распаде количество радиоактивных атомов убывает со временем по экспоненциальному закону (закон радиоактивного распада в интегральной форме)

$$ N_{ra}(t) = N_{ra0} \exp(-t/\tau). \qquad (11.5) $$

Важнейшими характеристиками этого процесса являются среднее время жизни радиоактивного изотопа τ и период полураспада $\tau_{1/2}$. Иногда вводят скорость распада R_{dec}, которая равна τ^{-1}.

Из примерно трёх тысяч ядер (нуклидов), известных в настоящее время, стабильны примерно 400. Эти ядра концентрируются на карте изотопов вдоль линии бета-стабильности, определяемой уравнением

$$Z = \frac{A}{2} - \frac{0{,}2A^2}{A + 200}. \qquad (11.6)$$

Особенно важное значение для повседневной жизни имеет радиоактивность урана. Он содержится в почвах (особенно в гранитах), и в результате цепочки радиоактивных превращений из него образуется радиоактивный радон. Радон является тяжелым инертным газом и поэтому, выходя из почвы, скапливается в наших домах. Дополнительным источником радона являются бетонные конструкции некоторых многоэтажных домов. Попадая вместе с воздухом в наши легкие и распадаясь там, радиоактивный радон наносит ущерб здоровью. Это одна из актуальнейших и пока не решённых проблем здравоохранения и гигиены во всём мире. Но уже сейчас ясно, что нужно:

1) как можно чаще делать влажную уборку жилищ;

2) как можно чаще проветривать помещения;

3) как можно больше времени проводить на открытом воздухе, где вашему здоровью будет вредить уже не радон, а выхлопные газы автомобилей, а также выбросы шинного, сажевого и нефтезаводов.

Задания для самостоятельного выполнения

11.1. Что такое радиоактивность? Приведите примеры.

11.2. Радиоактивный изотоп платины $^{182}\mathrm{Pt}$ испытывает альфа-распад с периодом полураспада 2,6 мин. На сколько процентов уменьшится число атомов этого изотопа за 35 сек? Напишите уравнение распада.

11.3. Радиоактивный тритий испытывает в основном бета-распад с периодом полураспада 12,3 года. Этот изотоп можно использовать для получения энергии в термоядерном синтезе. Разработан проект, предусматривающий доставку трития на Землю с Луны. Автором и руководителем разработки этого проекта долгое время был Харрисон Шмитт – по-

следний американский астронавт, ходивший пешком по Луне. На сколько уменьшится масса трития за время доставки, если космический грузовик летит со скоростью 14 км/сек? Начальная масса трития 1500 кг. Недостающие данные возьмите из справочников.

11.4. Какие доступные любому человеку справочные сведения позволяют убедиться в справедливости (или несправедливости) уравнения для линии бета-стабильности?

11.5. Радиоактивный изотоп золота ^{202}Au испытывает бета-минус-распад с периодом полураспада 28 сек. Кинетическая энергия испущенного электрона 1,5 МэВ. Найдите кинетическую энергию дочернего ядра и скорость вылетевшего электрона. Энергией и импульсом антинейтрино можно пренебречь.

11.6. При гамма-распаде из покоящегося ядра 200Hg* вылетает фотон, имеющий длину волны 3,5 пм. Вычислите кинетическую энергию ядра после испускания гамма-кванта (оно называется ядром отдачи).

12. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА И ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики – уравнение Шрёдингера – было получено Э. Шрёдингером в 1926 г. Неизвестной в этом уравнении является волновая функция, о которой шла речь в разделах 2 и 8. Уравнение Шрёдингера играет в квантовой механике ту же роль, что и второй закон Ньютона в классической механике. В декартовой системе координат уравнение Шрёдингера имеет вид [7, 14]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + W_p(x,y,z,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad (12.1)$$

где $\hbar = h/(2\pi)$, $\hbar = 1{,}054 \cdot 10^{-34}$ Дж·сек; $W_p(x,y,z,t)$ – потенциальная энергия частицы; $\Psi = \Psi(x,y,z,t)$ – волновая функция;

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \tag{12.2}$$

дифференциальный оператор Лапласа.

Уравнение Шрёдингера является линейным однородным дифференциальным уравнением в частных производных относительно Ψ. Оно, как и другие основные уравнения физики (например, законы Ньютона и уравнения Максвелла), не может быть выведено теоретически из других уравнений. Уравнение Шрёдингера является обобщением огромного числа экспериментальных данных. Правильность уравнения Шрёдингера подтверждается тем, что полученные с его помощью результаты согласуются с экспериментом. Чтобы найти волновую функцию любой нерелятивистской частицы, надо дополнить его условиями, которым должна удовлетворять волновая функция: 1) однозначность; 2) непрерывность вместе с первыми производными по координатам и времени; 3) интегрируемость функции $|\Psi(x, y, z, t)|^2$, т. е. нормируемость [4].

В общем случае потенциальная энергия частицы зависит от времени: $W_p = W_p(x, y, z, t)$. Однако для большого числа физических явлений, происходящих в микромире, поля, определяющие потенциальную энергию частицы, являются стационарными: $W_p = W_p(x, y, z)$. В этом случае уравнение Шрёдингера (12.1) можно упростить и прийти к так называемому стационарному уравнению Шрёдингера:

$$\Delta\Phi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(W - W_p\right)\Phi = 0. \tag{12.3}$$

Здесь W – полная энергия частицы, а волновые функции $\Psi(x, y, z, t)$ и $\Phi(x, y, z)$ связаны соотношением

$$\Psi(x, y, z, t) = \Phi(x, y, z)\exp\left(-\frac{iWt}{\hbar}\right). \tag{12.4}$$

Уравнения типа (12.3) имеют решения, удовлетворяющие условиям, налагаемым на волновую функцию, не при любых значениях параметра W, а лишь при определенном их наборе, характерном для данной задачи. Эти значения полной энергии частицы W называются собственными значениями, а соответствующие им решения – собственными функциями. Собственные значения W могут образовывать как непрерывный (в случае инфинитного движения), так и дискретный (в случае финитного движения) спектр.

Как уже упоминалось, с каждой квантовой частицей связан волновой вероятностный процесс. Наиболее полной количественной характеристикой этого волнового вероятностного процесса является волновая функция $\Psi(x, y, z, t)$ (другое её название – амплитуда вероятности). Квадрат модуля волновой функции определяет плотность вероятности найти частицу в момент времени t в точке с координатами x, y, z:

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 = \frac{d\Pi}{dV}. \tag{12.5}$$

Волновая функция (амплитуда вероятности) всегда является комплексной, поэтому знак модуля в формуле (12.5) играет существенную роль. В отличие от классической механики квантовое описание движения частицы имеет статистический, вероятностный характер. Вот ещё один пример хаотического (но теперь уже не теплового) движения частиц.

Задания для самостоятельного выполнения

12.1. Пусть волновая функция частицы имеет вид

$$\Psi(x, t) = A\exp(-a^2x^2 - i\omega t), \tag{12.6}$$

где a и A вещественные. Найдите постоянную A из условия нормировки.

12.2. Исходя из условий предыдущей задачи, найдите среднее значение и дисперсию координаты частицы.

12.3. Пусть ВФ частицы имеет вид (12.6). Найдите вероятность того, что частица находится в интервале $-0{,}20a^{-1} < x < 0{,}20a^{-1}$.

12.4. Пусть волновая функция частицы имеет вид

$$\Psi(x,t) = \Phi(x)\exp\left(-\frac{iW}{\hbar}\right). \tag{12.7}$$

Здесь $\Phi(x)$ – вещественная функция, которая имеет вид треугольника с вершиной на вертикальной оси и основанием, простирающимся от -20 нм до 30 нм. Найдите вероятность того, что частица находится в интервале -10 нм $< x < 4$ нм.

12.5. Получите стационарное уравнение Шредингера из нестационарного.

12.6. Пусть в некоторой точке пространства в некоторый момент времени волновая функция $\Psi = 2 + 3i$. Найдите Ψ^* и $|\Psi|$.

12.7. Пусть в некоторой точке пространства в некоторый момент времени волновая функция $\Psi = 2\exp(3i)$. Найдите Ψ^*, вещественную и мнимую части ВФ, а также $|\Psi|$.

13. ЧАСТИЦА В БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКОЙ ОДНОМЕРНОЙ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Потенциальная энергия частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной прямоугольной потенциальной яме (БГОППЯ) шириной a с нулевым дном, может быть записана в виде

$$W_p(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a); \\ \infty, & (x < 0,\ x > a). \end{cases} \tag{13.1}$$

Это значит, что она равна нулю внутри ямы и равна бесконечности вне ее.

Тогда стационарное уравнение Шрёдингера для частицы в БГОППЯ примет вид

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2mW}{\hbar^2}\Phi = 0. \qquad (13.2)$$

Очевидно, что вне ямы волновые функции должны быть тождественно равны нулю, так как вероятность того, что частица может проникнуть в область пространства, где ее потенциальная энергия бесконечно велика, равна нулю.

Тогда стационарные волновые функции, являющиеся решением уравнения Шрёдингера (13.2), должны удовлетворять граничным условиям:

$$\Phi(x = 0) = \Phi(x = a) = 0. \qquad (13.3)$$

Оказывается (в этом легко убедиться самостоятельно, так как процедура поиска решения дифференциального уравнения такого вида, как уравнение Шрёдингера для частицы в яме, хорошо известна из теории колебаний), что граничные условия могут быть удовлетворены только для дискретного набора значений энергии частицы:

$$W_n = \frac{\pi^2\hbar^2(n+1)^2}{2ma^2} \quad (n = 0,1,2,\dots). \qquad (13.4)$$

Параметр n в формуле (13.4) называется главным квантовым числом, определяет номер энергетического уровня и отражает дискретный характер энергетического спектра частицы. Это означает, что квантовая частица, находясь в яме, не может иметь произвольное значение энергии; энергия квантовой частицы может принимать значения лишь из дискретного набора. Говорят, что энергия частиц квантуется. Значение $n = 0$ соответствует основному (невозбужденному) состоянию частицы, в котором частица может находиться сколь угодно долго, все другие состояния явля-

ются возбужденными. Находясь на более высоком уровне (в возбужденном состоянии), частица будет стремиться в течение короткого времени «сбросить» избыток энергии (например, испустить фотон) и перейти в основное состояние.

Стационарные волновые функции, являющиеся решением стационарного уравнения Шрёдингера для частицы в БГОППЯ и удовлетворяющие граничным условиям и условию нормировки, имеют вид

$$\Phi_{\mathrm{n}}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left[\frac{\pi(n+1)x}{a}\right]. \tag{13.5}$$

Напомним, что квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности.

Заметим, что при изучении поведения многих квантовых систем часто оказывается более важным знать не само решение уравнения Шрёдингера (волновые функции), а спектр разрешенных энергетических состояний частицы.

Задания для самостоятельного выполнения

13.1. Нарисуйте стационарные волновые функции для третьего возбужденного состояния частицы в БГОППЯ.

13.2. Изобразите потенциальную яму, в которой движется мячик, если он подпрыгивает, ударяясь об землю.

13.3. Получите формулу (13.5).

13.4. Найдите плотность вероятности обнаружить электрон в БГОППЯ с нулевым дном в середине ямы, если он находится: 1) в основном состоянии; 2) в первом возбужденном состоянии.

13.5. Вычислите разность энергий второго и четвертого уровней энергии протона при движении его в БГОППЯ с нулевым дном шириной 12 фм. Ответ выразите в мегаэлектронвольтах (МэВ).

13.6. Вычислите разность энергий четвертого и шестого возбужденных уровней энергии электрона при движении его в БГОППЯ с нулевым дном шириной 0,12 нм. Ответ выразите в электронвольтах (эВ).

13.7. Частица массой $5{,}2 \cdot 10^{-22}$ г движется в БГОППЯ с нулевым дном шириной 20 пм. Сколько фотонов длиной волны 500 нм может излучить эта частица при переходе из шестого возбужденного в третье возбужденное состояние?

14. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Для одномерного гармонического осциллятора (ГО) зависимость потенциальной энергии от координаты частицы хорошо известна и имеет вид

$$W_p(x) = \frac{\tilde{k}x^2}{2}, \tag{14.1}$$

если положение равновесия частицы совпадает с началом координат. Напомним, что $\tilde{k}$ – это обобщённая жёсткость ГО. Движение такой квантовой частицы должно напоминать движение небольшого тела, закрепленного на пружине, – классического гармонического осциллятора. Стационарное уравнение Шрёдингера для такой квантовой системы принимает вид

$$\Delta\Phi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(W - \frac{\tilde{k}x^2}{2}\right)\Phi = 0. \tag{14.2}$$

Граничные условия состоят в том, что частица не может оказаться далеко от положения равновесия, т. е. волновая функция должна быстро убывать при бесконечном удалении от положения равновесия. В отличие от классической частицы, которая не может покинуть пределы потенциальной ямы, квантовая частица может обнаруживаться за пределами ямы. Наличие граничных условий в конечном счете приводит к тому, что

спектр разрешенных энергетических состояний становится дискретным (как и в БГОППЯ):

$$W_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 0,1,2,\dots). \tag{14.3}$$

Энергетический спектр вида (14.3) называется эквидистантным. Это значит, что энергетический интервал между любыми двумя соседними уровнями энергии один и тот же:

$$W_{n+1} - W_n = \hbar\omega_0. \tag{14.4}$$

Квантовый гармонический осциллятор не может иметь энергию меньше W_0. Эта энергия называется энергией нулевых колебаний. Здесь мы опять сталкиваемся со второй базовой идеей физики о неустранимости движения.

Волновые функции, являющиеся решением уравнения (14.2) с упомянутыми граничными условиями, имеют вид

$$\Phi_{\mathrm{n}}(\xi) = N_n H_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \tag{14.5}$$

где $N_n = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$ – нормировочный множитель; (14.6)

$H_n(\xi) = (-1)^n\exp(\xi^2)\dfrac{d^n\exp(-\xi^2)}{d\xi^n}$ – полиномы Эрмита; (14.7)

$\xi = x\left(\dfrac{m\omega_0}{\hbar}\right)^{1/2}$ – безразмерная переменная, пропорциональная координате. (14.8)

Задания для самостоятельного выполнения

14.1. Нарисуйте стационарные волновые функции для третьего возбужденного состояния гармонического осциллятора.

14.2. Изобразите потенциальную яму, соответствующую движению шарика, колеблющегося на ниточке, если амплитуда колебаний не мала.

14.3. Вычислите наименьшее возможное значение энергии квантового гармонического осциллятора, собственная циклическая частота колебаний которого равна $25\ \text{псек}^{-1}$.

14.4. Ион железа в узле кристаллической решетки – пример гармонического осциллятора. Найдите «расстояние» между соседними уровнями энергии такого осциллятора, если частота его колебаний приблизительно равна $10^{15}\ \text{сек}^{-1}$.

14.5. Вычислите энергию первых трех уровней для частицы массой 96 нг, которая может колебаться на «пружинке» жесткостью $12\ \text{мкН/м}$. Можно ли обнаружить дискретность энергетического спектра этой частицы, если энергия теплового движения равна $0{,}022\ \text{эВ}$?

14.6. Оцените количество состояний гармонического осциллятора в интервале энергии от 1,00 до 1,01 нДж. Жесткость осциллятора равна 3,2 мкН/м, масса – 9,6 нг.

14.7. Представим два «осциллятора» в виде слона и мышки, каждый из которых подвешен на пружинке, которая под их собственным весом растягивается на 9 см. Сколько уровней энергии «слонового» осциллятора уложится ниже первого возбужденного уровня энергии «мышиного»?

15. ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ

Квантовая частица, с движением которой связан волновой вероятностный процесс, в отличие от классической, может проникать из одной классически разрешенной области в другую даже в случае, когда энергия

частицы лежит ниже барьера. Это явление называется туннельным эффектом. Именно таков механизм альфа-распада и спонтанного деления ядер. В полупроводниковой электронике туннельный эффект впервые наблюдал Лео Есаки в 1958 г. С тех пор туннельные диоды широко используются. Туннельный эффект работает в устройствах флеш-памяти.

Рассмотрим случай, когда потенциальный барьер имеет прямоугольную форму (рис. 15.1) [14] и частица приближается к барьеру со стороны области I, причем полная энергия частицы меньше высоты потенциального барьера: $W < W_b$. Можно записать стационарное уравнение Шрёдингера для областей I, II и III. Из решения получившейся системы уравнений следует, что волновая функция отлична от нуля и в области II, и в области III. Таким образом, существует отличная от нуля вероятность обнаружения частицы за барьером в области III, т. е. вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер. При этом частица не «взбирается» на вершину потенциального барьера, а как бы «просачивается» сквозь него. Это чисто квантовое явление, не имеющее классического аналога.

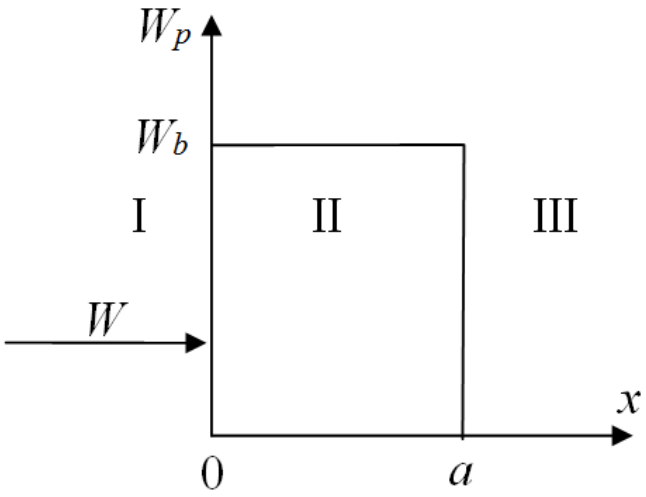

Рис. 15.1. Прямоугольный потенциальный барьер

Главная характеристика туннельного эффекта – коэффициент прозрачности барьера, равный вероятности того, что частица пройдет сквозь барьер с одной попытки.

Для одномерного прямоугольного барьера шириной a и высотой W_b (рис. 15.1) точное выражение для коэффициента прозрачности барьера Π_b имеет вид

$$\Pi_b = \frac{4k_b^2k^2}{(k_b^2+k^2)^2\mathrm{sh}^2(k_ba)+4k_b^2k^2}, \tag{15.1}$$

где

$$k = \sqrt{2mW}/\hbar\,, \tag{15.2}$$

$$k_b = \sqrt{2m(W_b-W)}/\hbar\,, \tag{15.3}$$

W – полная механическая энергия частицы; sh – гиперболический синус, который определяется выражением

$$\mathrm{sh}(\alpha) = \frac{\exp(\alpha)-\exp(-\alpha)}{2}. \tag{15.4}$$

Если процесс глубоко подбарьерный, т. е. $k_ba \gg 1$, то Π_b можно приближенно вычислить по формуле

$$\Pi_b \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}a\sqrt{2m(W_b-W)}\right]. \tag{15.5}$$

Для барьера произвольной формы коэффициент прозрачности может быть вычислен по формуле

$$\Pi_b \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\big(W_p(x)-W\big)}dx\right], \tag{15.6}$$

где x_1 и x_2 – классические точки остановки, т. е. точки входа под барьер и выхода из-под него соответственно. Формула (15.6) справедлива лишь в том случае, когда коэффициент прозрачности много меньше единицы. Точную аналитическую формулу в общем случае получить невозможно. Из формул (15.1), (15.5), (15.6) видно, что Π_b существенно зависит от мас-

сы частицы m, ширины барьера a и его высоты W_b: чем больше масса частицы, ширина и высота барьера, тем меньше вероятность прохождения частицы сквозь него.

Задания для самостоятельного выполнения

15.1. Оцените прозрачность прямоугольного барьера высотой $23 \cdot 10^{-13}$ Дж и толщиной 20 фм для альфа-частицы, имеющей полную энергию 8,5 МэВ.

15.2. Вероятность прохождения нейтрона через прямоугольный барьер высотой 12,5 МэВ и шириной 9,2 фм составляет 1,5 %. Какова скорость этого нейтрона?

15.3. Пусть нейтрон движется в яме, изображённой на рис. 15.2. Высота барьера 8,7 МэВ, его толщина 2,1 фм, ширина ямы 7,6 фм. Какова вероятность того, что нейтрон, находящийся в основном состоянии, не распавшись, покинет яму благодаря туннельному эффекту?

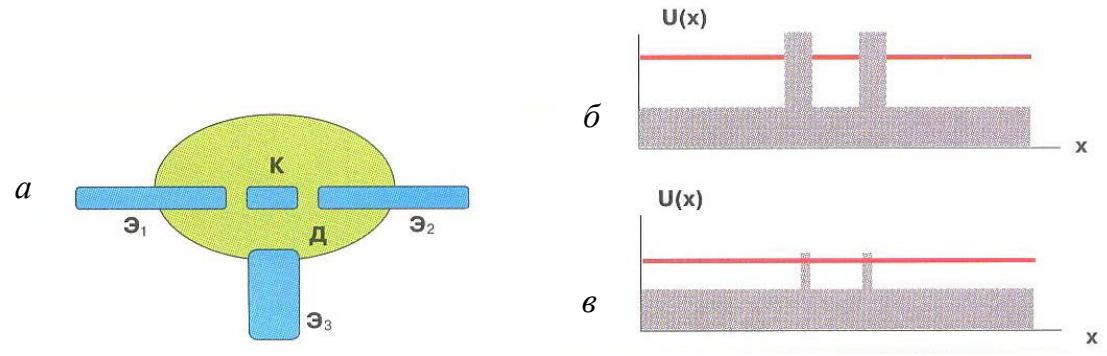

Рис. 15.2. Одноэлектронный транзистор:
а – схематическое изображение; *б* – потенциальная энергия электрона в транзисторе с широкой толщиной барьеров; *в* – потенциальная энергия электрона в транзисторе с узкой толщиной барьеров

15.4. Какова связь между принципиальной возможностью существования жизни на Земле и туннельным эффектом?

15.5. Приведите примеры ядерно-физических явлений, объясняемых туннельным эффектом.

15.6. Изобразите на графике зависимость коэффициента проницаемости прямоугольного барьера: а) от его толщины; б) от его высоты.

15.7. Пусть в одноэлектронном транзисторе, изображённом на рис. 15.2, ширина ямы 10 нм, толщина барьера 3 нм, высота барьера в закрытом состоянии, отсчитанная от дна ямы, 1,5 эВ, электрон находится в нулевом состоянии. Барьеры одинаковые. Оцените коэффициент прозрачности барьера.

15.8. Сколько времени может жить электрон в одноэлектронном транзисторе из задачи 15.7? Под временем жизни будем понимать время, за которое вероятность найти электрон в кластере К (см. рис. 15.2 [13]) уменьшается со 100 до 90 %.

15.9. До какой высоты нужно понизить потенциальный барьер в одноэлектронном транзисторе из двух предыдущих задач, чтобы время жизни электрона в кластере стало в тысячу раз больше периода его классического движения между стенками?

16. АТОМ ВОДОРОДА. ВОДОРОДОПОДОБНЫЕ ИОНЫ

В настоящее время известно, что большая часть материи, принимающей участие в гравитационном взаимодействии, не взаимодействует с электромагнитным излучением (так называемое тёмное вещество). О его свойствах почти ничего неизвестно. Структурными элементами окружающего нас «светящегося» вещества являются молекулы, которые, в свою очередь, состоят из атомов. Если движение макроскопических тел можно с разумной точностью описать при помощи классической механики Ньютона, то движение атомов в молекулах и электронов в атомах без квантовой механики понять нельзя даже приближенно. Простейшей квантовой системой является атом или ион, содержащий ядро и один электрон [4].

Состояние электрона в атоме водорода или в водородоподобном (т. е. содержащем только один электрон) ионе определяется четырьмя кванто-

выми числами [18, 19]. Это главное квантовое число n ($n = 0, 1, 2, \ldots$), орбитальное квантовое число l ($l = 0, 1, 2, \ldots, n$), магнитное орбитальное квантовое число m_{lz} ($m_{lz} = -l, -l + 1, \ldots 0, \ldots, l - 1, l$), магнитное спиновое квантовое число m_{sz} ($m_{sz} = -1/2, +1/2$).

Каждое из квантовых чисел соответствует физической величине, значение которой точно определено в данном состоянии. Главное квантовое число определяет энергию электрона. Орбитальное квантовое число определяет модуль орбитального момента импульса, который связан с движением электрона:

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}. \tag{16.1}$$

Магнитное орбитальное квантовое число определяет значение проекции орбитального момента импульса L на некоторую выделенную ось (традиционно в роли такой оси выступает ось z). «Выделить» ось легче всего, поместив атом в магнитное поле, поэтому данное квантовое число и называется магнитным. Часто атом даже и не надо специально помещать в магнитное поле, ведь его создают многие природные объекты (Земля, Солнце). На взаимодействии частиц (правда, не атомов) с сильным искусственным магнитным полем основаны методы ядерного магнитного и электронного парамагнитного резонанса, которые широко применяются в медицине и технике.

Состояние электрона в обсуждаемом случае символически записывается в виде $(n + 1)\gamma$, где $\gamma = s$ при $l = 0$; $\gamma = p$ при $l = 1$; $\gamma = d$ при $l = 2$; $\gamma = f$ при $l = 3$. С бóльшими значениями орбитального квантового числа обычно сталкиваться не приходится.

Собственные значения энергии водородоподобного иона определяются исключительно главным квантовым числом и могут быть представлены в виде

$$W_n = -\frac{W_i}{(n+1)^2}. \tag{16.2}$$

В этом разделе, как и во всех квантовых задачах о финитном движении частицы, главное квантовое число отсчитывается от нуля [4]. Это позволяет единым образом квантовать все системы: при $n = 0$ всегда есть основное состояние, число узлов волновой функции всегда равно n. Следует, однако, помнить о том, что в большинстве учебников для атома водорода n отсчитывается от единицы.

Из формулы (16.2) видно, что с увеличением номера уровня расстояние между уровнями энергии становится всё меньше и спектр становится квазинепрерывным. Этот результат является частным случаем принципа соответствия, согласно которому при больших n законы квантовой механики переходят в законы классической физики. Всякая новая теория (например, квантовая механика) включает в себя старую теорию (в данном случае – классическую механику), указывая границы ее применимости, и в предельных случаях новая теория переходит в старую.

Величина $W_i = -W_0$ называется энергией ионизации и вычисляется по формуле

$$W_i = \frac{\widetilde{m}_e e^4 Z^2}{2\hbar^2 (4\pi\varepsilon_0)^2} = \frac{\widetilde{m}_e e^4 Z^2 k_e^2}{2\hbar^2}, \tag{16.3}$$

где $\widetilde{m}_e$ – приведенная масса ядра и электрона, которая менее чем на 1 % отличается от массы электрона, и мы не будем между ними делать различия в дальнейшем; Z – зарядовое число (число протонов) ядра водородоподобного иона. Численное значение энергии ионизации атома водорода равно 13,6 эВ.

Схема уровней энергии водородоподобного иона изображена на рис. 16.1. Кроме самих уровней энергии на рис. 16.1 показаны также некоторые переходы электрона, в результате которых атом (ион) может поглощать или излучать энергию.

Переходы электрона с уровня на уровень ограничены так называемыми правилами отбора, которые являются следствием законов сохранения.

Для водородоподобных ионов это правило заключается в том, что орбитальное квантовое число при переходе должно изменяться (уменьшаться или увеличиваться) только на единицу. Это правило отбора связано с законом сохранения момента импульса и величиной спина фотона. Обратите внимание на то, что число спиновых состояний фотона не три, а только два, хотя спин фотона равен единице. Это отклонение от нормы связано с тем, что фотон не имеет массы покоя.

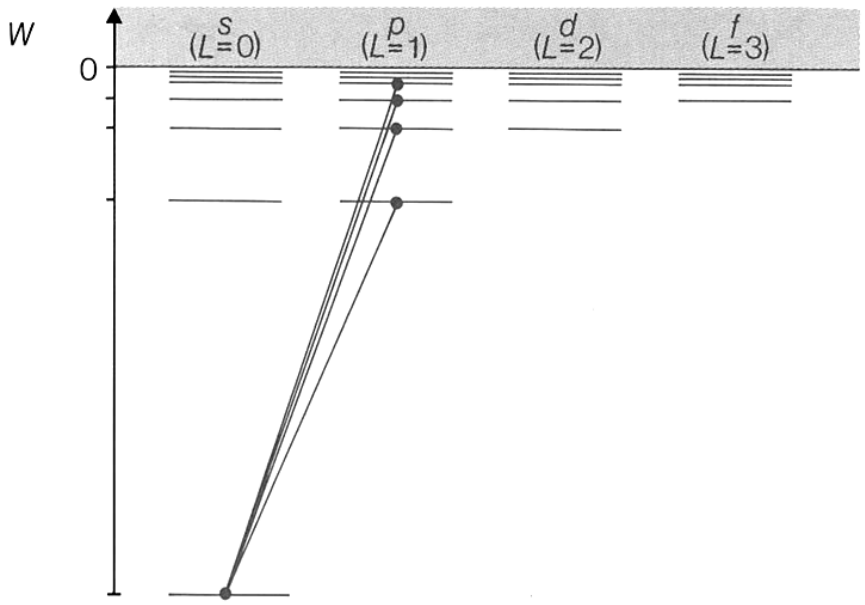

Рис. 16.1. Схема энергетических уровней атома водорода и водородоподобного иона с учётом орбитального квантового числа. Показаны переходы, соответствующие серии Лаймана

Группа (серия) спектральных линий, возникающих при переходе электрона из возбужденных состояний с $n > 0$ в основное состояние, называется серией Лаймана (см. рис. 16.1).

Серия спектральных линий, возникающих при переходе электрона из возбужденных состояний с $n > 1$ в состояние $n = 1$ называется серией Бальмера; за ней следуют серии Пашена (переходы в состояние с $n = 2$), Брэкета (переходы в состояние с $n = 3$), Пфунда (переходы в состояние с $n = 4$) и Хамфри (переходы в состояние с $n = 5$).

Пример 16.1. Какой должна быть длина волны монохроматического света, чтобы при возбуждении атомов водорода квантами этого света в спектре излучения наблюдались шесть спектральных линий? [4]

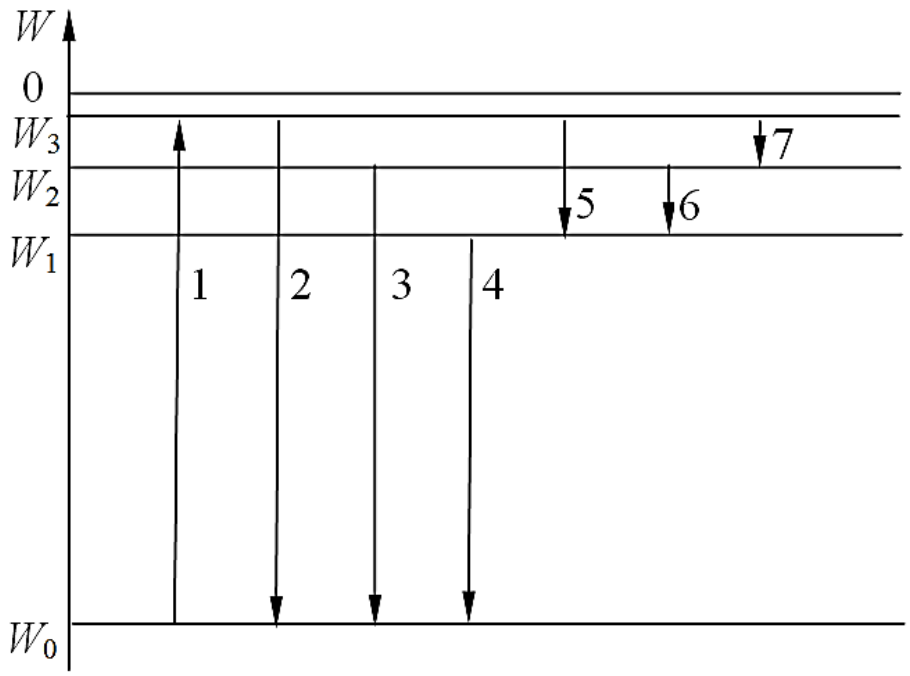

Рис. 16.2. Схема энергетических уровней атома водорода и водородоподобного иона без учёта орбитального квантового числа. Цифрами 2–7 показаны возможные переходы с первых трёх возбуждённых состояний, при которых энергия атома (иона) уменьшается

Дано:
$W_i = 13{,}6$ эВ $=$
$= 13{,}6 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ Дж.

λ–?

Решение. При переходе атома водорода с первого возбужденного уровня с энергией W_1 в основное состояние с энергией W_0 в спектре излучения наблюдается спектральная линия, соответствующая переходу, обозначенному цифрой 4 на рис. 16.2. Если атом водорода перевести во второе возбужденное состояние с энергией W_2, в спектре излучения наблюдаются спектральные линии, соответствующие переходам, обозначенным на рис. 16.2 цифрами 3, 4 и 6. Если атом водорода перевести в третье возбужденное состояние с энергией W_3, в спектре излучения наблюдаются спектральные

линии, соответствующие переходам, обозначенным на рис. 16.2 цифрами 2–7 – шесть спектральных линий. Для того чтобы перевести атом водорода из основного состояния с энергией $W_0 = -W_i$ в третье возбужденное состояние с энергией W_3 (линия, обозначенная цифрой 1 на рис. 16.2), атому нужно сообщить энергию

$$W = W_3 - W_0. \tag{16.4}$$

С учетом соотношения (16.2)

$$W = -\frac{W_i}{(3+1)^2} - (-W_i) = \frac{15}{16} W_i. \tag{16.5}$$

Перейти из состояния с энергией W_0 в состояние с энергией W_3 атом может, поглотив фотон, энергия которого

$$W = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}, \tag{16.6}$$

где λ – длина волны фотона.

Приравняем правые части формул (16.5) и (16.6) друг к другу, найдем длину волны фотона:

$$\lambda = \frac{16 \cdot 2\pi\hbar c}{15 W_i}; \tag{16.7}$$

$$\lambda = \frac{16 \cdot 6{,}626 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{15 \cdot 13{,}6 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}} = 9{,}7 \cdot 10^{-8} \text{ м}.$$

Задания для самостоятельного выполнения

16.1. Каким должен быть порядковый номер элемента, чтобы его водородоподобный ион мог излучить фотон с длиной волны, равной 100 пм.

16.2. С какой скоростью движется атом водорода после испускания фотона, соответствующего максимальной длине волны в серии Лаймана?

16.3. Что из перечисленного можно узнать, решив уравнение Шредингера для электрона в атоме: а) зависимость координаты электрона от времени; б) по какой орбите движется электрон; в) зависимость скорости электрона от времени; г) вероятность, с которой электрон находится в той или иной точке пространства.

17. ТОЖДЕСТВЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ. ФЕРМИОНЫ И БОЗОНЫ. ПРИНЦИП ЗАПРЕТА ПАУЛИ

До сих пор мы обсуждали движение одной частицы (задача двух тел тоже сводится к движению одной частицы). Теперь мы переходим к изучению многочастичных систем, состоящих из одинаковых (тождественных) частиц. Во многих случаях можно считать, что взаимодействие между этими частицами крайне мало или вовсе отсутствует и частицы движутся независимо друг от друга в некотором поле. Тогда систему частиц (или квазичастиц) можно рассматривать как квантовый идеальный газ. Забегая вперёд, в качестве примеров можно привести нуклонный ферми-газ в атомном ядре, электронный ферми-газ в металлах, бозе-газ куперовских пар в проводниках, перешедших в состояние сверхпроводимости.

Так как частицы тождественны, энергетические спектры (совокупность одночастичных уровней) всех частиц одинаковы и определяются из решения уравнения Шрёдингера для отдельной частицы. Чтобы определить, как частицы (или квазичастицы) распределяются по этим одночастичным уровням, необходимо ответить на вопрос: сколько частиц одного типа (type) N_t может находиться в одном квантовом состоянии с энергией W_i, т. е. в состоянии с определёнными значениями четырёх квантовых чисел (n, l, m_{lz}, m_{sz})?

Для некоторых частиц $N_t(W_i)$ ничем не ограничено, такие частицы называются бозонами. Бозоны всегда имеют целый или нулевой спин. Бозонами являются, в частности, все частицы, переносящие взаимодействия (например, фотоны).

Существует много типов частиц, число которых в одном квантовом состоянии не может быть больше единицы: $N_t(W_i) = 0$ или 1. Такие частицы называются фермионами. Фермионы имеют полуцелый спин: $s = 1/2, 3/2, 5/2$ и т. д. К фермионам со спином $1/2$ относятся протоны, нейтроны, электроны, дырки, кварки. Тот факт, что число фермионов в одном квантовом состоянии не больше единицы, называется принципом запрета Паули.

Разделение квантовых частиц на два класса – фермионы и бозоны – происходит как бы «само собой»; причиной этого является принцип тождественности одинаковых частиц. Пусть наша система состоит из двух тождественных частиц (1-я и 2-я). Каждая из этих частиц может находиться либо в состоянии «*A*», либо в состоянии «*C*». Амплитуда вероятности того, что 1-я частица находится в состоянии *A*, а вторая – в состоянии *C*, имеет вид

$$\Psi_a = \Psi_a(1A, 2C). \tag{17.1}$$

Переставим частицы местами:

$$\Psi_b = \Psi_b(2A, 1C). \tag{17.2}$$

Поскольку частицы тождественные, физически эти два состояния системы неразличимы. Следовательно, волновые функции Ψ_a и Ψ_b могут различаться только фазой:

$$\Psi_b = \Psi_a \exp(i\alpha). \tag{17.3}$$

Переставим частицы ещё раз. Теперь мы вернулись в исходное состояние, а фаза волновой функции при второй перестановке увеличилась ещё на α:

$$\Psi_a = \Psi_a \exp(2i\alpha). \tag{17.4}$$

Итак, $\exp(2i\alpha)$ должна быть равна 1. Следовательно, $\alpha = \pi$ или 2π. В первом случае одна перестановка частиц приводит к тому, что амплитуда вероятности меняет знак. Если состояния A и C совпадают, то получается, что $\Psi_b = \Psi_a$, но, с другой стороны, согласно (17.3) $\Psi_b = -\Psi_a$. Единственное число, обладающее таким свойством, – это ноль. Стало быть, частиц, для которых $\alpha = \pi$, в одном квантовом состоянии может быть не больше одной. Это фермионы. Если $\alpha = 2\pi$, то такого ограничения для волновой функции не возникает и в одном квантовом состоянии может находиться сколько угодно частиц. Такие частицы – бозоны.

Задания для самостоятельного выполнения

17.1. Сформулируйте принцип запрета Паули.

17.2. Для каких частиц справедлив принцип запрета Паули?

18. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФЕРМИ – ДИРАКА. ЭНЕРГИЯ ФЕРМИ

Как известно, структурные элементы ядер и атомов – протоны, нейтроны, электроны – являются фермионами. Поэтому полезно остановиться подробнее на распределении фермионов по уровням энергии (распределении Ферми – Дирака).

Ферми-частицы распределяются по состояниям с соблюдением принципа Паули. При этом во многих системах возникает ситуация, когда несколько разных одночастичных состояний характеризуются одним и тем же значением энергии. Тогда на схемах энергетических уровней на одном и том же уровне изображается несколько частиц, как, например, на рис. 18.1. Принципу Паули это не противоречит, так как энергии частиц одинаковы, а состояния разные. Уровни же заполняются исходя из принципа минималь-

ной энергии. В предельном случае нулевой абсолютной температуры частицы заполняют уровни по порядку, начиная с самого низкого.

Самый верхний из заполненных уровней энергии называется уровнем Ферми. Его энергия – энергия Ферми – вычисляется для фермионов со спином $1/2$ по формуле

$$W_F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_ч}\left(\frac{3N_ч}{\pi V}\right)^{2/3}. \qquad (18.1)$$

Здесь $m_ч$ – масса одной частицы-фермиона; $N_ч$ – число частиц-фермионов в системе; V – объем, в котором находятся фермионы. Энергия Ферми, вычисленная таким образом, отсчитывается от дна ямы.

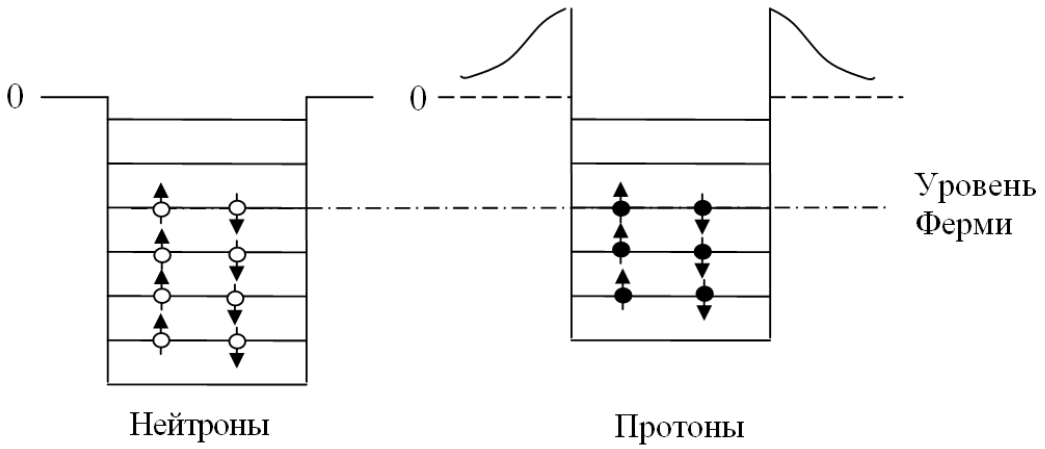

Рис. 18.1. Распределение нейтронов и протонов по уровням энергии в холодном ядре

Энергию Ферми для нуклонов в ядре принято выражать в мегаэлектронвольтах (МэВ), а энергию Ферми для электронов проводимости в металле – в электронвольтах (эВ).

Если ферми-систему нагревать, то фермионы, находящиеся вблизи уровня Ферми, будут переходить на более высокие уровни энергии. Распределение фермионов по уровням в нагретом ферми-газе изображено на рис. 18.2 [4].

В состоянии теплового равновесия среднее число фермионов в одном квантовом состоянии с энергией W_i (вероятность заполнения состояния) выражается следующей формулой:

$$\langle N_F \rangle (W_i) = \left\{ \exp\left(\frac{W_i - W_F}{k_B T} \right) + 1 \right\}^{-1}. \tag{18.2}$$

Формула (18.2) называется распределением Ферми – Дирака.

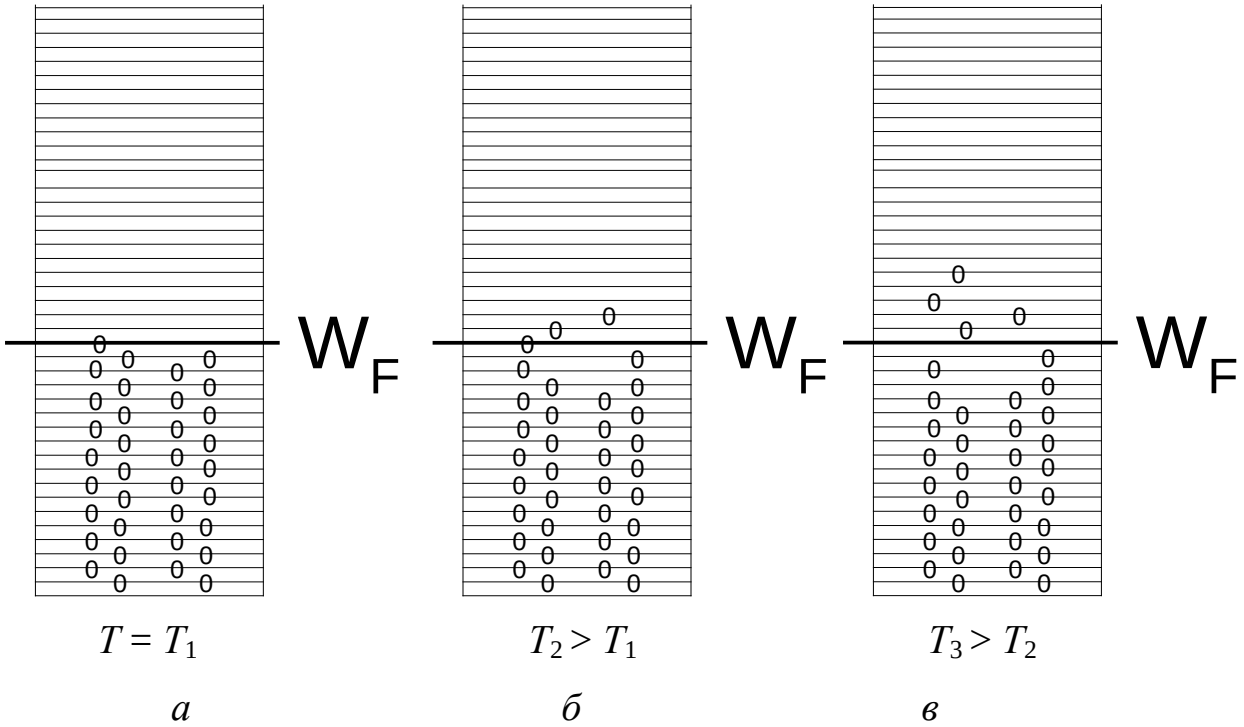

Рис. 18.2. Распределение фермионов по уровням при разных значениях температуры: $T = T_1 = 0$ (*а*); $T_2 > T_1$ (*б*); $T_3 > T_2$ (*в*)

Можно добавить, что в системах тождественных бозонов при $T = 0$ все частицы стремятся занять низшее одночастичное состояние. С увеличением температуры всё большее число частиц переходит на вышележащие энергетические уровни. Среднее число бозонов в одном квантовом состоянии с энергией W_i определяется формулой

$$\langle N_B \rangle (W_i) = \left\{ \exp\left(\frac{W_i}{k_B T} \right) - 1 \right\}^{-1}. \tag{18.3}$$

Формула (18.3) называется распределением Бозе – Эйнштейна для фотонов. Это единственный тип бозонов, с которым нам придётся иметь дело.

Пример 18.1. Вычислить энергию Ферми протонов в ядре германия-74 [4].

Дано:	
${}^{74}_{32}\mathrm{Ge}$;	
$m_p = 6{,}7 \cdot 10^{-27}$ кг.	
W_F–?	

Решение. В ядре германия-74 содержатся 32 протона. В роли $N_{\text{час}}$ выступает число протонов Z, в роли $m_{\text{час}}$ – масса протона m_p. Объем ядра, считая его шарообразным, можно найти по формуле

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3. \tag{18.4}$$

Радиус ядра R можно рассчитать (приблизительно) по формуле (2.3). В данной задаче $A = 74$.

Подставив равенство (18.4) с учетом выражения (2.3) в уравнение (18.1), получим значение энергии Ферми:

$$W_F = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_p}\left(\frac{3Z}{\pi V}\right)^{2/3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_p}\left(\frac{9Z}{\pi^2 4r_0^3 A}\right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m_p r_0^2}\left(\frac{9\pi Z}{4A}\right)^{2/3}; \tag{18.5}$$

$$W_F = \frac{(1{,}054 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 1{,}67 \cdot 10^{-27}(1{,}2 \cdot 10^{-15})^2}\left(\frac{9\pi \cdot 32}{4 \cdot 74}\right)^{2/3} = 0{,}482 \cdot 10^{-11}\text{Дж} =$$
$$= 30\ \text{МэВ}.$$

Задания для самостоятельного выполнения

18.1. Нарисуйте график распределения Бозе – Эйнштейна.

18.2. Нарисуйте график распределения Ферми – Дирака, считая $W_F \gg k_B T$.

18.3. Электрон проводимости в кристалле меди находится на уровне, вероятность заполнения которого 82 %. Вычислите дебройлевскую длину волны этого электрона. Температура кристалла на 50 °C ниже его температуры плавления.

18.4. Вычислите энергию Ферми нейтронов в ядре тория-230.

18.5. Вычислите разницу между энергиями Ферми протонов и нейтронов в ядре германия-74.

18.6. Вычислите энергию Ферми электронов проводимости в свинце.

18.7. В кристалле натрия среднее число электронов проводимости с энергией, которая на 5 % меньше, чем энергия Ферми, равно 0,975. Какова температура кристалла?

18.8. Нейтрон в ядре свинца-208 находится на уровне, энергия которого на 10 МэВ меньше энергии Ферми. Вычислите дебройлевскую длину волны этого нейтрона.

18.9. В некотором проводящем кристалле электронный уровень, имеющий энергию 6,7 эВ, заполнен с вероятностью 17 % при температуре +145 °С. Определите концентрацию электронов проводимости в этом кристалле.

19. ОБОЛОЧЕЧНАЯ СТРУКТУРА АТОМОВ И ЯДЕР

Из школьного курса химии известно, что электроны, составляющие электронное облако атома, группируются в электронные оболочки. Атомы инертных газов ($Z = 2, 10, 18, 36, 54, 86, 118$) имеют замкнутые электронные оболочки и обладают повышенной стабильностью. Оторвать электрон от такого атома довольно трудно, а отрицательные ионы у инертных газов вообще не образуются. Химические соединения с участием инертных газов получить очень трудно.

Атомы с одним электроном на последней оболочке (иными словами, поверх замкнутой оболочки) – атомы щелочных металлов – легко ионизуются и вступают в химические связи. Атомы с одним недостающим электроном на последней оболочке – атомы галогенов – легко образуют отрицательные ионы и чрезвычайно химически активны.

Мы уже упоминали (раздел 16), что состояние электрона в атоме водорода или в водородоподобном ионе определяется четырьмя квантовыми числами (n, l, m_{lz}, m_{sz}), а энергия определяется только главным квантовым числом n. Те же квантовые числа используются и для описания состояния электрона в многоэлектронном атоме. Энергия электрона в таком атоме определяется суммой $n + l$, а электронные оболочки маркируются значением $n + 1$ (напомним, что мы во всех квантовых системах нумеруем n, начиная с нуля). Электронные орбитали соответствуют различным значениям орбитального квантового числа l (0, 1, 2 … n) и обозначаются строчными латинскими буквами (s, p, d, f, g). Орбитали одного типа отличаются значениями магнитного квантового числа m_{lz}. Поскольку последнее может принимать значения $-l, -l + 1, \dots 0, \dots, l - 1, l$, число орбиталей с квантовым числом l равно $(2l + 1)$. Согласно принципу Паули на каждой орбитали может находиться не более двух электронов, отличающихся спиновым квантовым числом m_{sz}.

Набор символов, указывающий главное квантовое число (точнее, $n + 1$ в нашей номенклатуре), l и число электронов на орбиталях данного типа, называется электронной конфигурацией атома. Например, $1s^2 2s^2 2p^3$ означает, что в состояниях с $n = 0, l = 0$ и $n = 1, l = 0$ находится по два электрона, а в состоянии $n = 1, l = 1$ – три электрона (определите, атому какого химического элемента соответствует указанная конфигурация).

Заполнение электронных оболочек происходит в соответствии с четырьмя «правилами»: принципом минимума энергии, правилом Клечковского, правилом Хунда и принципом Паули [18, 19]. Сначала заполняются оболочки с минимальной энергией, т. е. с минимальным значением $n + l$. При одинаковых значениях $n + l$ сначала заполняется состояние с меньшим n (это правило Клечковского).

Например, рассмотрим электронную конфигурацию атома железа ($Z = 26$). Вначале удобно выделить электронную конфигурацию ближай-

шего к железу инертного газа – аргона: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. Дальше идёт $4s^2 3d^6$. Казалось бы, орбитали $3d$ должны заполняться в предыдущей оболочке, но для $3d$ орбиталей $n + l = 2 + 2 = 4$. Это значение больше, чем для $4s$: $n + 1 = 3 + 0 = 3$. Поэтому в соответствии с принципом минимума энергии (минимума $n + l$) сначала заполняется орбиталь $4s$. Теперь могли бы заполняться орбитали $4p$ (для них $n + l = 3 + 1 = 4$), но $n = 3$ больше, чем $n = 2$ для $3d$ орбиталей. Таким образом, в соответствии с правилом Клечковского полная электронная конфигурация атома железа имеет вид $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^6$.

Правило Хунда определяет расположение электронов на орбиталях одного типа и на электронную конфигурацию не влияет.

Оказывается, что и для ядер характерна оболочечная структура, аналогичная электронным оболочкам атомов. Ядра, содержащие $Z = 2, 8, 20, 28, 50, 82$ протонов и/или $N = 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126$ нейтронов, обладают повышенной стабильностью по сравнению с прочими ядрами. Указанные особенные значения чисел протонов и нейтронов названы магическими числами, а ядра, содержащие магическое число протонов или нейтронов, – магическими ядрами. Ядра, у которых магические и Z, и N, называются дважды магическими [14]. Это всего лишь удобная терминология, не имеющая отношения к современным суевериям.

В 1950 г. Мария Гепперт-Майер разработала оболочечную модель ядер, которая объяснила периодичность в их свойствах. Успех этой модели удивителен, поскольку у ядра, в отличие от атома, нет силового центра. Кроме того, расстояния между нуклонами в ядре существенно меньше, а силы взаимодействия существенно больше, чем между электронами в атоме. Казалось бы, эти обстоятельства не позволят рассматривать нуклоны в ядре как независимые частицы, движущиеся в некотором центрально-симметричном поле. Тем не менее, оболочечная модель ядра оказалась достаточно успешной.

Ещё одно соображение следует принять во внимание. Электроны в атоме находятся в электрическом (кулоновском) поле ядра и друг друга. Энергия кулоновского взаимодействия двух частиц хорошо известна (см. формулу (10.2)). В отличие от атома, для энергии сильного ядерного взаимодействия нуклонов не существует простой формулы (формула (10.3) является очень приблизительной). Поэтому поле СиЯВ, действующее на нуклоны в ядре, часто подбирают эмпирически. Для лёгких ядер потенциал этого поля близок к потенциалу гармонического осциллятора (рис. 19.1).

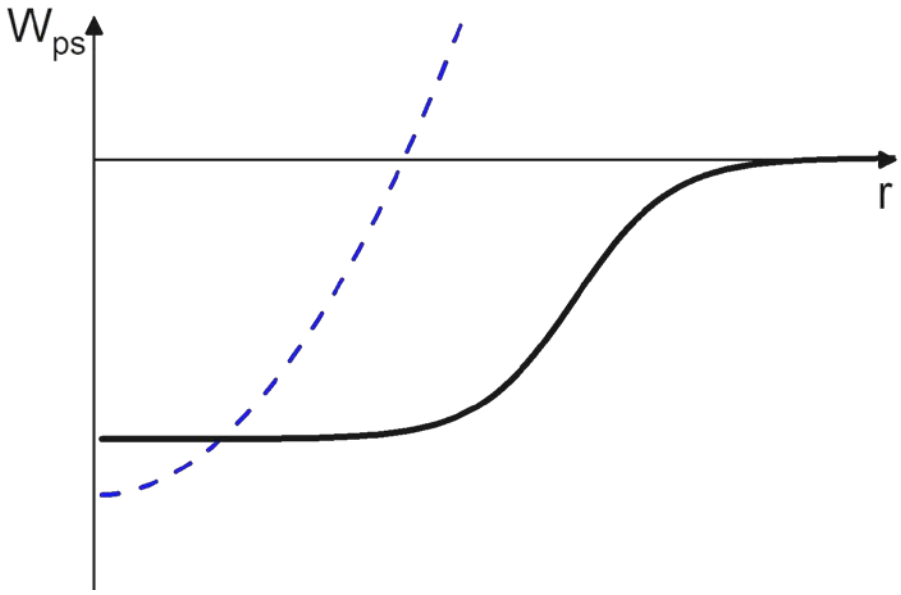

Рис. 19.1. Эффективная потенциальная энергия нуклона, соответствующая сильному ядерному взаимодействию, для лёгких (штриховая линия) и тяжёлых (сплошная линия) ядер

Для средних и тяжёлых ядер потенциальная энергия нуклона приблизительно постоянна внутри ядра, а в окрестности границы ядра резко стремится к нулю. Эти свойства хорошо отражает так называемый потенциал Вудса – Саксона

$$W_{pWS}(r) = -\frac{W_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_{ws}}{a_{ws}}\right)}, \tag{19.1}$$

также представленный на рис. 19.1. W_0 имеет смысл глубины потенциальной ямы для нуклонов, R_{ws} – радиуса ядра, a_{ws} – диффузности (толщины поверхностного слоя). Разумеется, абсолютное значение W_0 в формуле (19.1) (приблизительно 100 МэВ) сильно отличается от W_0 в формуле (10.5) (приблизительно 5 эВ).

Как и в случае электронов в атоме, состояния нуклонов в этом эффективном поле характеризуются четырьмя квантовыми числами [14]. Однако этот набор квантовых чисел несколько отличается от используемого для электронов. Итак, для описания состояния нуклона в ядре используются:

– главное квантовое число $n = 0, 1, 2, \ldots$ (определяет число узлов радиальной части волновой функции ядра);

– орбитальное квантовое число $l = 0, 1, 2, \ldots$ (состояния обозначаются соответственно $s, p, d, \ldots$, и, в отличие от электронов в атоме, ограничение по n отсутствует);

– квантовое число полного момента импульса $j = l \pm 1/2$ («плюс», если спин нуклона направлен по орбитальному моменту, и «минус», если против него);

– магнитное квантовое число $m_{jz} = -j, -(j-1), \ldots, +(j-1), j$ (определяет проекцию полного момента импульса на выделенное направление и для заданного j принимает $(2j+1)$ значений).

Обозначение состояния нуклона сходно с используемым для электронов. Например, обозначению $1g_{9/2}$ соответствует состояние с $n = 0, l = 4, j = 9/2$.

Энергия нуклона не зависит от m_{jz}, и энергетический уровень характеризуется квантовыми числами n, l, j. Уровни, близкие по энергии, группируются в оболочки (рис. 19.2).

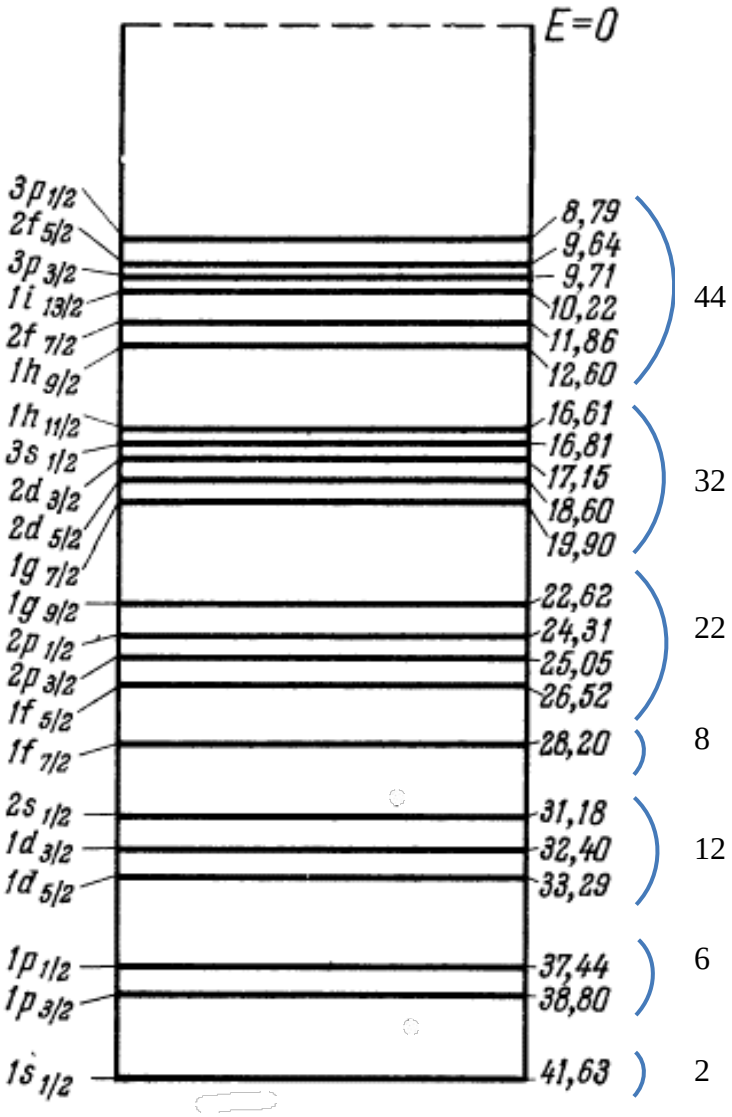

Рис. 19.2. Схема одночастичных уровней энергии нейтронов в ядре $^{208}_{82}$Pb, которая получается при использовании потенциала Вудса – Саксона. Числа в правой части отвечают количеству нейтронов на данной группе уровней

Промежутки между оболочками значительно больше разницы между уровнями внутри оболочек.

Задания для самостоятельного выполнения

19.1. Чем атомы с заполненными электронными оболочками отличаются от остальных?

19.2. Какими квантовыми числами характеризуется состояние нуклона в ядре?

20. ПОЛЕ КОНЦЕНТРАЦИИ. ДИФФУЗИЯ

Любая ФВ, значение которой зависит от точки пространства (т. е. от радиус-вектора $\vec{r}$) и момента времени t, представляет собой поле. Один из простейших примеров полевой величины – концентрация $n(\vec{r}, t)$. Когда она отклоняется от своего равновесного значения, возникает явление диффузии. Оно состоит в том, что концентрация возвращается (или стремится возвратиться) к своему равновесному значению.

Диффузия возникает, например, когда в полупроводнике создается градиент концентрации дырок или электронов проводимости. Такая ситуация особенно характерна для полупроводниковых приборов с p–n-переходами: диодов, транзисторов, тиристоров.

Уравнение диффузии при наличии внешнего поля имеет вид

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nabla\big(D_1 \cdot n(\vec{r}, t)\nabla W_p(\vec{r}) + D_2 \cdot \nabla n(\vec{r}, t)\big). \tag{20.1}$$

Здесь D_1 – коэффициент дрейфа, он связан с упорядоченным движением частиц за счет внешнего поля (например, электрического), потенциальная энергия которого $W_p(\vec{r})$; D_2 – коэффициент диффузии, он связан с хаотическим тепловым движением частиц. Часто $D_1 = \gamma^{-1}$, где γ – коэффициент вязкого трения, которое действует на частицу в среде. Уравнение (20.1) описывает, например, хаотическое движение «больших» броуновских частиц под воздействием «маленьких» частиц среды во внешнем поле.

В простейшем случае внешнее поле отсутствует (свободная диффузия), а диффузия происходит только вдоль одной оси x. Рисунок 20.1 иллюстрирует процесс диффузии в этом случае и подсказывает, что решение уравнения диффузии имеет вид распределения Гаусса

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{(x - x_m)^2}{2\sigma^2}\right] \tag{20.2}$$

с дисперсией, зависящей от времени. Из рисунка видно, что с течением времени распределение частиц становится более широким: частицы «расползаются» в пространстве. Если подставить распределение (20.2) в одномерное уравнение свободной диффузии, то можно показать, что

$$\sigma^2 = 2D_2 \cdot t. \tag{20.3}$$

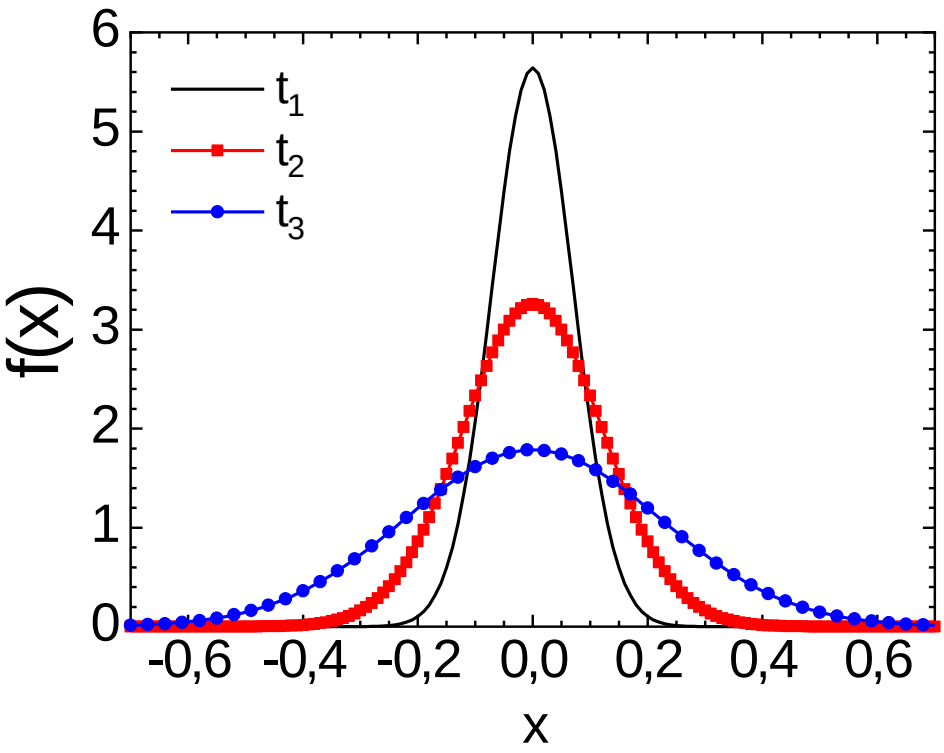

Рис. 20.1. Нормальное распределение частиц для трех моментов времени: $t_3 > t_2 > t_1$

В действительности движение частиц всегда ограничено. Рассмотрим случай, когда частицы диффундируют, находясь в поле с потенциалом гармонического осциллятора

$$W_p(x) = \frac{kx^2}{2}. \tag{20.4}$$

Решение нужно искать опять в виде распределения Гаусса, в котором параметры x_m и $b = \sigma^2$ зависят от времени. Обозначение b введено, чтобы получающиеся дифференциальные уравнения можно было решать аналитически. Начальные условия $x_m(0) = x_{m_0}$ и $b(0) = b_0$. Дальше надо подставлять распределение Гаусса с зависящими от времени x_m и b в уравнение диффузии и находить производные $\partial n/\partial t$, $\partial n/\partial x$ и $\partial^2 n/\partial x^2$. Должно получиться уравнение, содержащее x_m и b, а также их производные в качестве неизвестных функций времени. В этом уравнении надо приравнять нулю коэффициенты при x^0, x^1, x^2. Тогда получатся три дифференциальных уравнения, одно из которых содержит только b и $\partial b/\partial t$, но не содержит x_m и dx_m/dt. Уравнение на b решается довольно просто. Когда $b(t)$ известно, уравнение для x_m тоже решается. В итоге должно получиться

$$\sigma^2(t) = b_0 \exp(-2kD_1 t) + \frac{D_2}{kD_1}\{1 - \exp(-2kD_1 t)\}. \tag{20.5}$$

С течением времени σ^2 должно стремиться к равновесному значению, которое входит в распределение Гиббса:

$$f(x) = \alpha_2 \exp\left(-\frac{kx^2}{2k_B T}\right). \tag{20.6}$$

Из этого факта и из формулы (20.5) можно получить связь между коэффициентами дрейфа и диффузии.

Важной задачей, связанной с диффузией, является задача о скорости распада метастабильного состояния (рис. 20.2). Такая задача возникает при описании деления возбуждённых атомных ядер или при образовании наночастиц за счёт коагуляции (например, свёртывание крови, https://en.wikipedia.org/wiki/Coagulation).

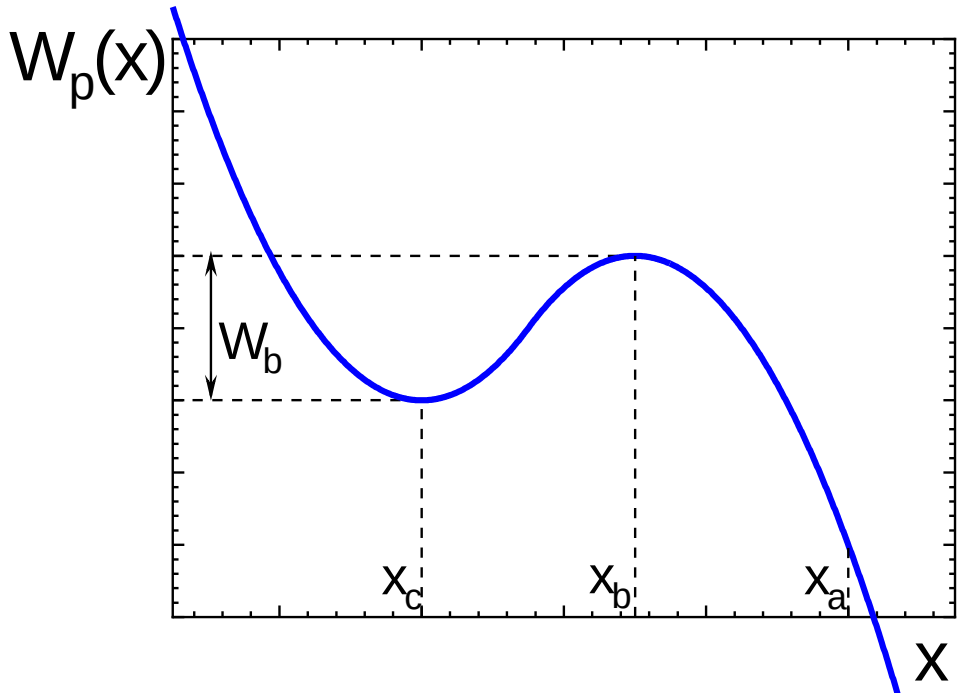

Рис. 20.2. Типичная потенциальная энергия в задаче о распаде метастабильного состояния. Квазистационарное (метастабильное) состояние имеет координату x_c; x_b – точка вершины потенциального барьера (barrier); x_a – точка невозврата (absorption)

Броуновские частицы первоначально находятся вблизи квазистационарного состояния x_c. Если бы не флуктуации, которые обусловлены случайным воздействием среды, броуновские частицы никогда бы не попали ни в точку x_b, ни в точку x_a.

Траектории нескольких броуновских частиц, полученные с помощью компьютерного моделирования, показаны на рис. 20.3. Для системы с высоким барьером ($W_b \gtrsim k_B T$) чаще всего встречаются траектории типа 1, которые отвечают равновесным флуктуациям вблизи квазистационарного состояния. Однако иногда за счет последовательности однонаправленных больших флуктуаций возникают траектории типа 2, которые и приводят к распаду метастабильного состояния. Понятно, что, если бы моделирование проводилось для большего временного промежутка, число частиц, преодолевших барьер, было бы больше. Подчеркнем, что динамика процесса при движении частицы от квазистационарного состояния до седло-

вой точки и динамика процесса от седловой точки до точки невозврата абсолютно различны. На первом участке только флуктуации «толкают» частицу к седловой точке, а трение и рост потенциальной энергии препятствуют этому. Таким образом, процесс распада возникает исключительно благодаря флуктуациям. Чтобы подчеркнуть это, на рис. 20.3 изображена редкая траектория типа 3: частица преодолевает седловую точку несколько раз и лишь затем начинает двигаться к точке невозврата.

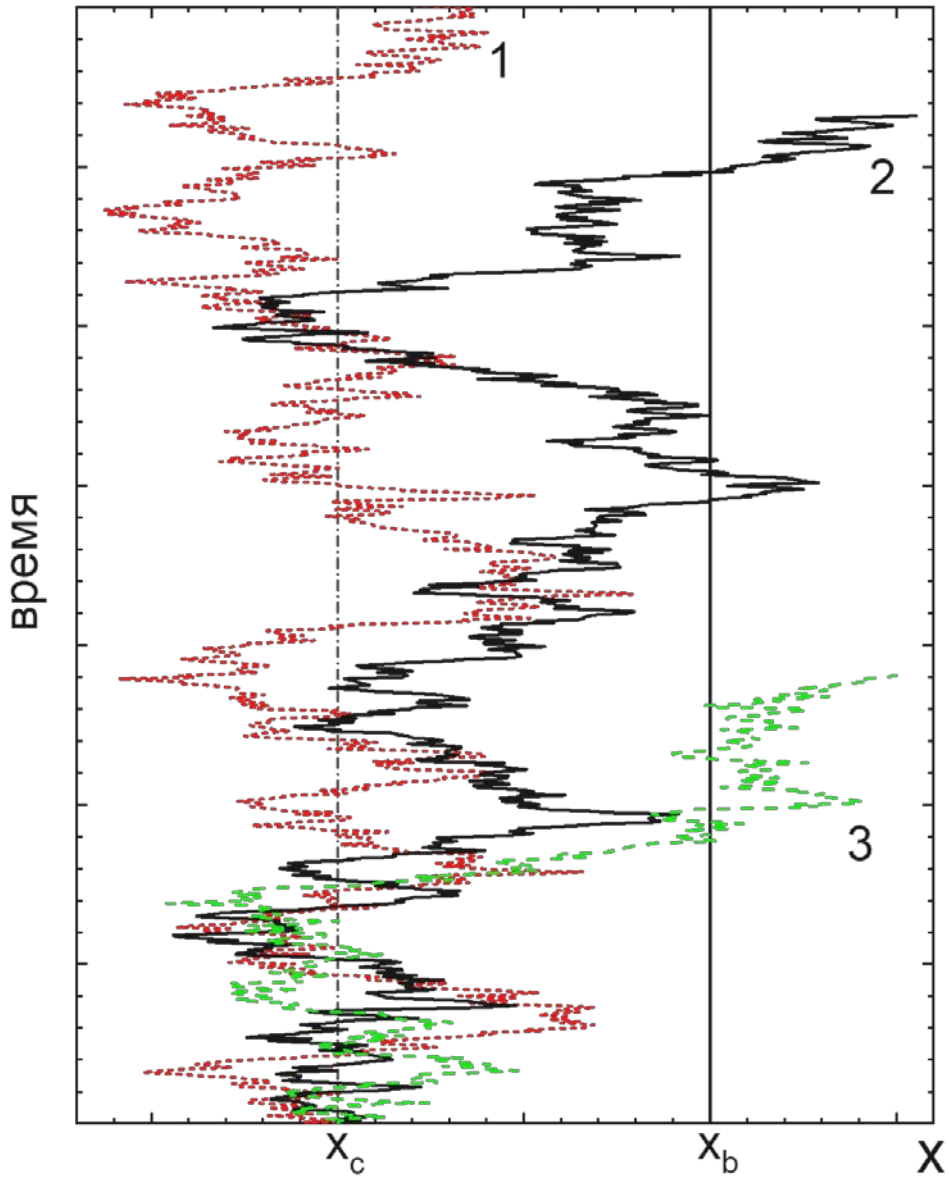

Рис. 20.3. Типичные траектории броуновских частиц в поле с потенциальной энергией, изображённой на рис. 20.2

На участке от x_b до x_a потенциальная энергия убывает, и частица довольно быстро «скатывается с горки» к точке невозврата. Этот спуск замедляется за счет трения. Флуктуации могут приводить как к ускорению, так и к замедлению процесса и в среднем не влияют на скорость спуска.

Количественной характеристикой обсуждаемого процесса является скорость распада. Выражение

$$R_a = \frac{1}{N_{tot} - N_a(t)} \frac{dN_a(t)}{dt} \tag{20.7}$$

определяет динамическую скорость распада (например, скорость деления атомных ядер или скорость коагуляции). Здесь N_{tot} – полное число частиц, участвующих в моделировании; $N_a(t)$ – число частиц, достигших точки невозврата к моменту времени t. Типичная зависимость $R_a(t)$ изображена на рис. 20.4.

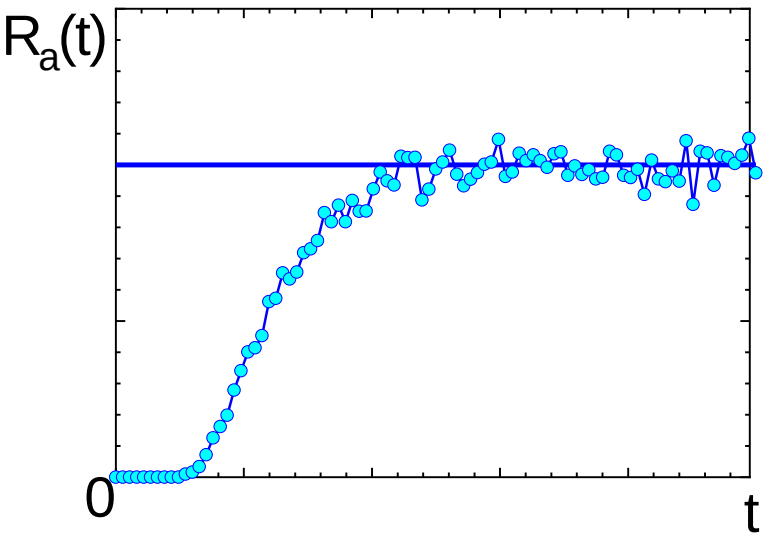

Рис. 20.4. Зависимость динамической скорости распада от времени моделирования. Такая же кривая, только без осцилляций, получается при моделировании с использованием уравнения диффузии. В начальный момент времени все частицы имеют координату x_c (см. рис. 20.2)

Сначала происходит диффузия частиц до барьера и установление квазистационарного распределения вблизи дна ямы. Затем частицы «перева-

ливают» через барьер и достигают точки x_a. Появляется ток частиц через эту точку, который со временем достигает квазистационарного значения. Его мы будем называть квазистационарной скоростью распада R_{qs}. Термин «квазистационарная» подчеркивает, что эта величина остается постоянной в течение долгого времени, но в конце концов, когда $N_a(t)$ станет близким к N_{tot}, формула (20.7) теряет смысл. Она содержательна только до тех пор, пока $dN_a(t) \ll N_{tot} - N_a(t)$.

Для получения R_{qs} в динамическом моделировании часто требуются большие затраты компьютерного времени. Поэтому для вычисления R_{qs} полезно иметь приближенную аналитическую формулу. Такая формула получается при решении уравнения диффузии и имеет вид

$$R_{qs} = \frac{k_B T}{\gamma}\left\{\int_{x_c}^{x_a} \exp\left[\frac{W_p(q)}{k_B T}\right] dq \int_{-\infty}^{x_b} \exp\left[-\frac{W_p(x)}{k_B T}\right] dx\right\}^{-1}. \qquad (20.8)$$

Задания для самостоятельного выполнения

20.1. Получите связь между D_1 и D_2.

20.2. Получите формулу для $\sigma^2(t)$.

20.3. Используя дифференциальное уравнение на $b(t)$, получите формулу для $x_m(t)$.

20.4. Какова вероятность того, что частица при свободной диффузии вдоль оси x имеет координату между 50 мм и 60 мм в момент времени 20 сек? Коэффициент трения 30 аДж·сек/м^2, температура 300 К. В начальный момент времени частица находилась в точке с координатой 10 мм.

20.5. Какова вероятность того, что броуновский осциллятор жесткостью 15 аН/м, совершающий колебания вдоль оси y, имеет координату между 1,5 фм и 2,0 фм в момент времени 2,0 асек? Коэффициент трения 200 мДж·сек/м^2, температура 10 ГК. В начальный момент времени осциллятор имел координату 12 фм.

20.6. Напишите формулу для потенциальной энергии, график которой изображен на рис. 20.2 и представляет собой две гладко сшитые параболы одинаковой жесткости. Высота барьера W_b, а также x_c и x_b считаются известными.

20.7. Из формулы (20.8) получите приближенную формулу для скорости распада в случае потенциальной энергии, изображённой на рис. 20.2 (см. предыдущую задачу).

20.8. Напишите формулу для потенциальной энергии, график которой представляет собой две гладко сшитые параболы разной жесткости. Высота барьера W_b, жесткость левой параболы k_c, а также x_c и x_b считаются известными.

20.9. Из формулы (20.8) получите приближенную формулу для скорости распада в случае потенциальной энергии, описанной в предыдущей задаче.

21. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ В КРИСТАЛЛАХ

Несомненно, символами начала XXI века являются персональный компьютер (ПК) и мобильный телефон (МТ). Ни ПК, ни МТ не могут работать без чипа – полупроводникового кристалла кремния, который представляет собой интегральную микросхему, содержащую огромное число транзисторов, диодов, резисторов, конденсаторов. Как можно сделать из кремния такие функционально разные элементы? Почему чипы делают на основе кремния (порядковый номер в Периодической таблице 14), а не на основе, скажем, алюминия (порядковый номер 13)? Почему в ПК так важно охлаждение многих элементов? Почему ещё 30 лет назад не было ни ПК, ни МТ, ни дешёвых полупроводниковых лазеров, без которых интернет работает в сотни раз медленнее? Как работают не так давно появившиеся на массовом рынке флеш-карты?

Чтобы ответить на эти и многие другие вопросы, возникающие у каждого, кто хоть сколько-нибудь интересуется современной техникой, надо опираться на понимание строения атомов. Известно, что атомы могут находиться лишь в строго определённых дискретных квазистационарных состояниях. При этом электроны движутся вблизи ядра, имея постоянную энергию, т. е. находясь на энергетических уровнях. При сближении атомов волновые функции их электронов перекрываются, а уровни энергии расщепляются, как показано на рис. 21.1 и 21.2 [9, 11].

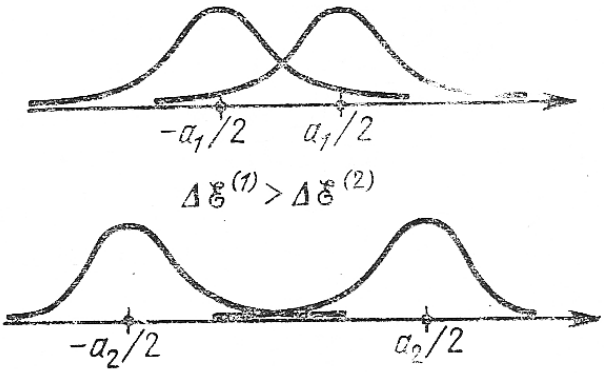

Рис. 21.1. Плотности вероятности для электронов в двух одинаковых атомах при большом (внизу) и малом (вверху) расстоянии между ними

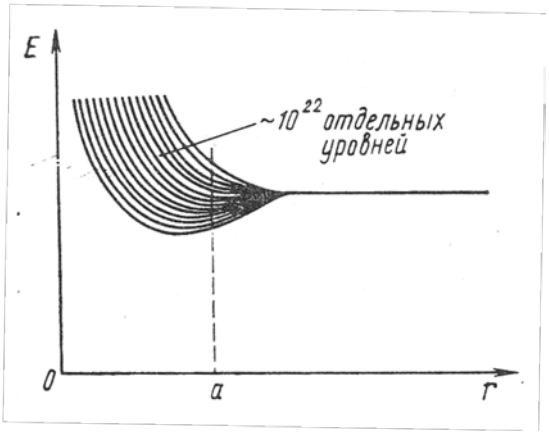

Рис. 21.2. Зависимость энергии уровня электрона в атоме от расстояния между атомами

Атомы представляют собой потенциальные ямы для электронов, отделённые друг от друга потенциальными барьерами. Электроны могут проникать от одного атома к другому (переходить от «своего» атома к «чужому») благодаря туннельному эффекту (см. раздел 15). При этом между электронами соседних атомов возникает специфический квантовый эффект, называемый обменным взаимодействием. Оно приводит к появлению дополнительной энергии и расщепляет атомный уровень на столько уровней, сколько имеется взаимодействующих атомов [20]. Так из каждого атомного уровня энергии образуется энергетическая зона кристалла. Каковы будут электрические свойства кристалла? Это зависит от того, как заполнились электронами образовавшиеся зоны. Три случая, изображённые на рис. 21.3, со-

ответствуют диэлектрикам (*а*), проводникам (*б*) и полупроводникам (ПП, *в*). Электроны, находящиеся в зоне, заполненной целиком, не принимают участия в электропроводности.

Если температуру ПП увеличивать, некоторые электроны из самой верхней заполненной зоны (она называется валентной) будут переходить в самую нижнюю из свободных зон (она называется зоной проводимости). Таким образом, проводимость ПП с увеличением температуры может увеличиваться.

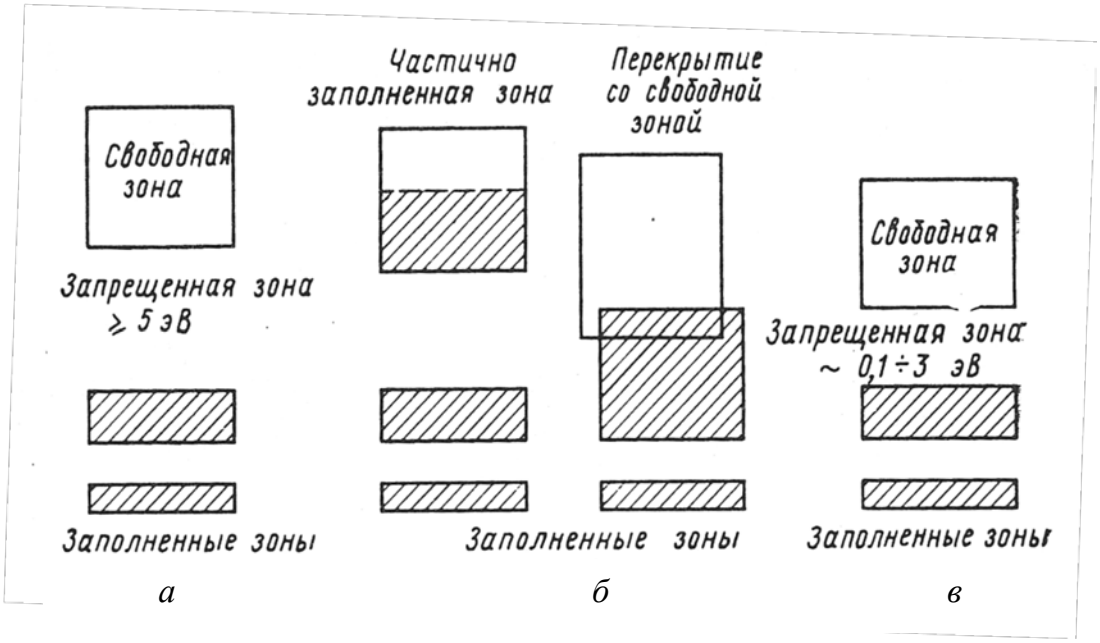

Рис. 21.3. Варианты взаимного расположения и заполнения зон для разных кристаллов:
а – диэлектрик; *б* – металл; *в* – полупроводник

Микроскопическое выражение для плотности тока имеет вид

$$\vec{j} = \sum_{i=1}^{N} |q_i| n_i b_i \vec{E}. \qquad (21.1)$$

Подвижность носителей тока данного вида b_i – это коэффициент пропорциональности между средней скоростью их направленного движения u_i (её еще называют дрейфовой скоростью) и напряжённостью электрического поля в проводнике:

$$u_i = b_i E. \qquad (21.2)$$

Заряд носителя тока в металлах и полупроводниках – это просто элементарный заряд. А вот подвижности и концентрации могут быть очень разными. В основном удельные проводимости (или удельные сопротивления) разных веществ различаются из-за того, что сильно различаются концентрации носителей тока. Чтобы понять, почему так велико это различие, удобно пользоваться зонными диаграммами.

Задания для самостоятельного выполнения

21.1. Каким образом из кремния изготавливают полупроводниковые резисторы?

21.2. Почему большую часть ПП элементов изготавливают на основе кремния?

21.3. Почему для работы ПП элементов так важно охлаждение?

22. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК В ПОЛУПРОВОДНИКАХ: СОБСТВЕННЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ

Полупроводниковые материалы имеют две важнейшие особенности, определяющие их электрические свойства. Первая состоит в том, что их электрическое сопротивление уменьшается с ростом температуры. Вторая особенность – исключительная чувствительность полупроводников (ПП) к наличию примесей. С одной стороны, эти особенности мешают использованию полупроводников: при изменении температуры проводимость может выйти из рабочей области, а прежде чем использовать ПП, его надо очищать от неконтролируемых примесей. Зато можно легко создать прибор высокой чувствительности для измерения температуры (терморези-

стор), а также получать ПП с желаемыми свойствами, внося контролируемые примеси (этот технологический процесс называется легированием). Основными элементными технологическими ПП являются германий и кремний, оба они четырёхвалентны.

На рисунке 22.1 показаны зонные диаграммы собственного ПП при трёх температурах $T_2 > T_1 > T_0$, $T_0 = 0$ (W_g – ширина запрещённой зоны). При нулевой абсолютной температуре нижняя из показанных зон (валентная зона) целиком заполнена электронами, и ни один из них не может перейти в более высоколежащее состояние, принимая энергию от электрического поля. Проводимость такого вещества равна нулю. При нагревании ПП ($T = T_1$) часть электронов переходит из валентной зоны в более высоколежащую зону (зону проводимости). Это не конкретные электроны (их нельзя занумеровать), а возбуждённые электронные состояния. Такие возбуждённые состояния удобно рассматривать как квазичастицы и называть их электронами проводимости.

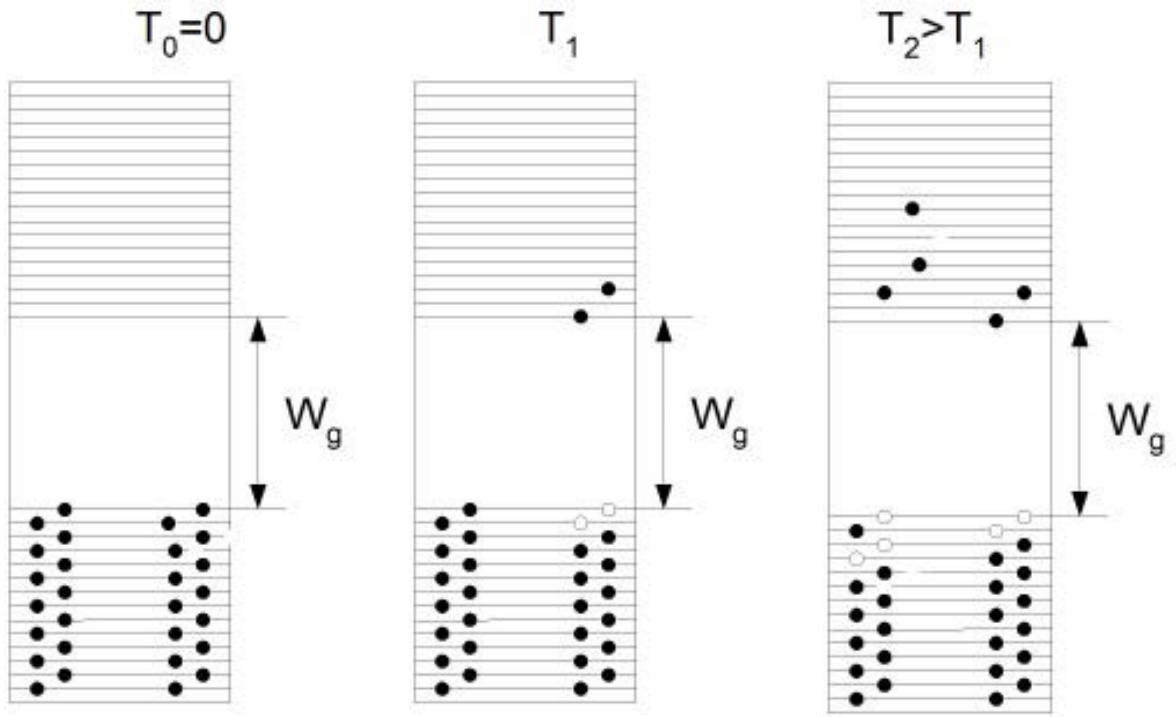

Рис. 22.1. Зонные диаграммы собственного ПП при разных температурах

В валентной зоне образовались вакантные места, благодаря чему электроны могут легко переходить в более высоколежащие состояния. Однако электронов в валентной зоне очень много, а вакантных мест – очень мало. Поэтому удобнее следить за таким вакантным местом – квазичастицей, которая называется дыркой.

Для ПП микроскопическое выражение для плотности тока имеет вид

$$\vec{j} = e\vec{E}(nb_e + pb_h). \tag{22.1}$$

Здесь n – концентрация электронов проводимости; p – концентрация дырок; b_e – подвижность электронов проводимости; b_h – подвижность дырок.

Кроме подвижности важной характеристикой любой квазичастицы является её эффективная масса ($\mathrm{m_e^*}$ для электрона проводимости и $\mathrm{m_h^*}$ для дырки). Эти характеристики приведены в табл. 22.1.

Таблица 22.1

Свойства собственных полупроводников при 300 К

Вещество	InSb	Ge	Si	InP	GaAs	GaP	SiC
b_e, см^2(В · сек)$^{-1}$	78 000	3 800	1 300	4 600	8 500	300	230
b_h, см^2(В · сек)$^{-1}$	750	1 820	500	150	420	75	70
$\mathrm{m_e^*/m_e}$	0,014	0,22	0,33	0,073	0,067	0,12	0,25
$\mathrm{m_h^*/m_e}$	0,4	0,39	0,81	0,6	0,5	0,56	1,00
$\mathrm{W_g}$, эВ	0,180	0,664	1,11	1,34	1,43	2,27	2,86

Подвижности и концентрации могут быть очень разными (см. табл. 22.1 [21]). Электроны, находящиеся в зоне, заполненной целиком, не принимают участия в электропроводности. Если температуру ПП увеличивать, некоторые электроны из валентной зоны будут переходить в самую нижнюю из свободных зон (она называется зоной проводимости). Таким образом, проводимость ПП с увеличением температуры может увеличиваться [20].

Рассмотрим сначала идеализированную ситуацию: ПП, в котором абсолютно отсутствуют примеси. Такой ПП называется собственным полупроводником (intrinsic semiconductor, ПП i-типа, iПП). В нём концентрация электронов проводимости (n_i) равна концентрации дырок (p_i). И электроны проводимости, и дырки постоянно рождаются (этот процесс называется «генерация») и гибнут (этот процесс носит название «рекомбинация»). В состоянии равновесия $n_i \neq n_i(t)$, следовательно скорость генерации равна скорости рекомбинации. Микроскопическое выражение для концентрации носителей в iПП имеет вид

$$n_i = \sqrt{N_c N_\mathrm{v}} \exp\left(-\frac{W_g}{2k_B T}\right). \tag{22.2}$$

В этой формуле величины

$$N_c = 2\frac{(2\pi k_B T m_e^*)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} \tag{22.3}$$

и

$$N_\mathrm{v} = 2\frac{(2\pi k_B T m_h^*)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} \tag{22.4}$$

имеют смысл концентрации доступных электронных и дырочных состояний соответственно в зоне проводимости (c) и в валентной (v) зоне. Подставляя (22.3) и (22.4) в (22.2), получаем рабочую формулу для вычисления n_i:

$$n_i = 2\frac{\left(2\pi k_B T\sqrt{m_e^* m_h^*}\right)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{W_g}{2k_B T}\right). \tag{22.5}$$

Здесь W_g – энергия активации электрон-дырочной пары, которая в iПП равна ширине запрещённой зоны (англ. *gap* – щель, дыра, промежуток). На самом деле, вместо W_g надо было бы писать $\Delta W_{c\mathrm{v}}$, потому что ширина запрещённой зоны – это как раз $W_c - W_\mathrm{v}$. Здесь W_c – энергия дна зоны проводимости, а W_v – энергия потолка валентной зоны (они показаны ниже на рис. 24.1). Однако обозначение W_g является стандартным, и мы только им в дальнейшем и будем пользоваться. Формула (22.5) очень напоминает распределение Больцмана (или Гиббса). Отличие заключается лишь в двойке в знаменателе аргумента экспоненты, которая появляется из-за того, что носители тока в iПП рождаются парами. Эффективные массы электрона m_e^* и дырки m_h^*, а также значения W_g для некоторых ПП можно найти в табл. 22.1

Важнейшее значение для работы ПП устройств имеет диффузия носителей тока. Диффузия возникает всякий раз, как только распределение носителей по объему образца становится неоднородным (т. е. когда концентрация носителей зависит от координаты). Если в газах значительную роль при выравнивании неоднородностей играет конвекция, то в ПП диффузия является единственным механизмом, отвечающим за релаксацию концентрации носителей.

Важнейшая закономерность диффузии – зависимость среднего значения квадрата координаты частицы (например, электрона проводимости) от времени – выражается формулой

$$\langle x^2 \rangle = 2D_x t. \tag{22.6}$$

Коэффициент диффузии D_x связан с подвижностью носителей тока b соотношением Эйнштейна

$$D_x = bk_B T/e. \tag{22.7}$$

В этой формуле e – это элементарный заряд. Формула (22.7) связывает между собой коэффициент диффузии – характеристику хаотического

движения частиц и меру флуктуаций – с подвижностью, которая является диссипативной характеристикой частиц и описывает их реакцию на упорядочивающее внешнее воздействие. По этим причинам соотношение Эйнштейна называют еще иногда флуктуационно-диссипативной теоремой. Решая соответствующие задачи, надо учитывать, что при $T \simeq 100$ К и выше подвижность носителей тока убывает с температурой приблизительно как T^{-2}.

В отличие от газов, где молекулы не исчезают и не появляются, в ПП носители рождаются и, спустя некоторое время («время жизни»), погибают, рекомбинируя. Поэтому еще одной важной характеристикой хаотического движения носителей в полупроводниках является диффузионная длина. Под диффузионной длиной понимают среднеквадратичное значение координаты ($\sqrt{\langle x^2 \rangle}$), которое проходит в ПП носитель за время жизни.

Для того чтобы ускорить вычисления в задачах, полезно заранее найти, чему равен $1\ \text{эВ}/(2k_B)$ в кельвинах. Все концентрации надо рассчитывать в единицах, обратных кубическим сантиметрам (см$^{-3}$). Встречающиеся в задачах выражения типа $\frac{1}{x_1} - \frac{1}{x_2}$ для вычислений лучше приводить к виду $\frac{x_2 - x_1}{x_1 x_2}$. Это позволит избежать потери точности. Во всех задачах этого раздела предполагается, что примеси отсутствуют или их влиянием можно пренебречь.

Задания для самостоятельного выполнения

22.1. Определите концентрацию электронов проводимости в кремнии при $-30\ ^{\circ}\text{C}$.

22.2. Кристаллический образец содержит 0,17 моля некоторого химически простого вещества. Ширина разрешенной зоны равна 10 эВ. Оцените расстояние (разность энергий) между соседними энергетическими уровнями в зоне.

22.3. При какой температуре удельное сопротивление германия составит 0,48 Ом·м. Зависимостью подвижности от температуры при решении этой задачи следует пренебречь.

22.4. Определите, при какой температуре в монокристалле кремния объёмом 3,0 см^3 содержится 83,4 млн дырок.

22.5. Определите удельное сопротивление фосфида индия при 320 К.

22.6. Найдите коэффициент диффузии электронов проводимости в германии при 300 К.

23. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК В ПОЛУПРОВОДНИКАХ: ПРИМЕСНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ

Собственная проводимость ПП, как правило, не используется из-за наличия неконтролируемых примесей. А из легированных электронных и дырочных ПП изготавливают фоторезисторы, терморезисторы, тензорезисторы, датчики Холла, диоды Ганна. По поводу последнего надо помнить, что он никакой на самом деле не диод, а просто ПП резистор с сильно нелинейной вольт-амперной характеристикой (ВАХ).

Реальный ПП всегда содержит примеси. Предельно низкие концентрации посторонних примесей в SiC, которых удается достичь в процессе очистки, составляют 10^{16} см$^{-3}$, для GaAs – это 10^{13} см$^{-3}$. Лучше всего научились очищать кремний: концентрацию примесей в нем удается понизить до 10^{10} см$^{-3}$.

После того как ПП нужным образом очищен, в него вносят примесь. В кремнии это обычно атомы вещества с валентностью V или III. В первом случае «лишний» электрон атома примеси оказывается слабо связан со своим атомом, легко отрывается от него под действием температуры и становится электроном проводимости. Такая примесь называется донорной. Примерами донорной примеси в кремнии служат атомы фосфора, мышьяка и т. п.

Если в кремний вносится примесь с валентностью III, то «недостающий» электрон, необходимый для образования четырёх полноценных химических связей, «забирается» из числа электронов проводимости. Таким образом, в ПП возникает лишняя дырка. Такая примесь называется акцепторной. Примерами акцепторной примеси в кремнии служат атомы бора, алюминия и т. п.

Если в ПП доминирует донорная примесь (концентрация атомов донорной примеси N_d намного превосходит концентрацию атомов акцепторной примеси N_a) и если температура не слишком велика, то концентрация электронов проводимости намного превосходит концентрацию дырок, $n_n \gg p_n$. Индекс n указывает здесь на то, что полученный ПП является электронным полупроводником (negative semiconductor, nПП, ПП n-типа). Зонная схема ПП n-типа показана на рис. 23.1 [20].

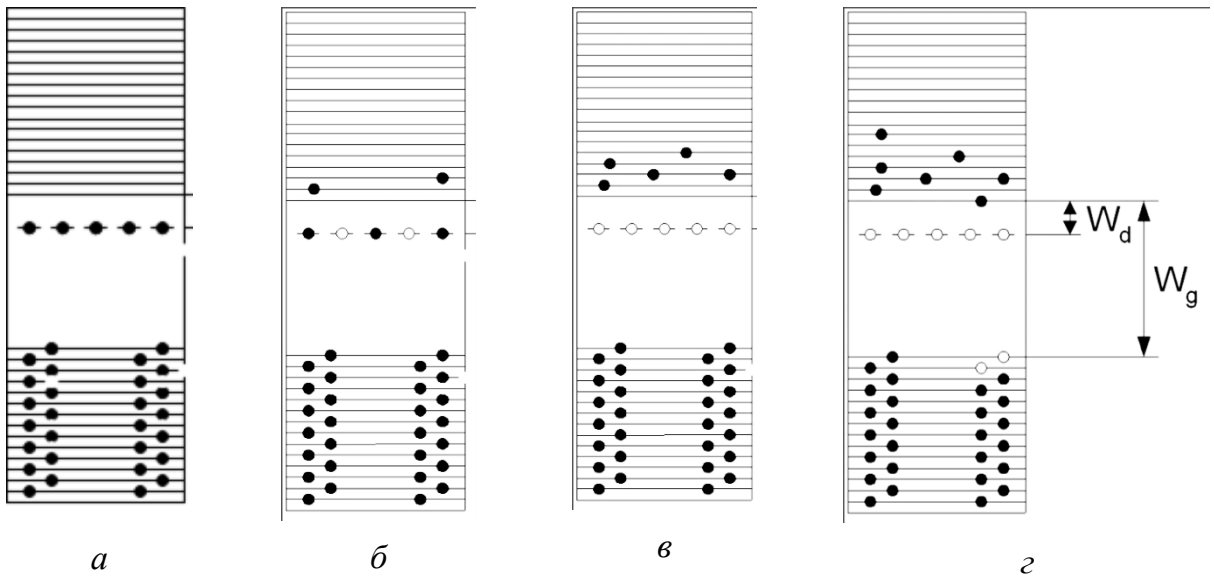

Рис. 23.1. Зонные диаграммы электронного ПП при разных температурах:
а – очень низкая температура; *б* – низкая температура; *в* – средняя температура – примесное истощение; *г* – высокая температура

В nПП в запрещённой зоне расположены локальные примесные уровни (они показаны штрихами). Из рисунка видно, что энергия активации донорной примеси W_d намного меньше ширины запрещённой зоны. В такой ситу-

ации говорят, что примесь мелкая. Обычно мелкую примесь подбирают так, чтобы при рабочих температурах все её атомы были ионизованы. Именно такой случай – полное примесное истощение – изображён на рис. 23.1, *в* и *г*. Видно, что некоторая часть проводимости может быть обусловлена электронами, пришедшими из валентной зоны.

Если в ПП доминирует акцепторная примесь (концентрация атомов донорной примеси N_d намного меньше концентрации атомов акцепторной примеси N_a) и если температура не слишком велика, то концентрация электронов проводимости намного меньше концентрации дырок, $n_p \ll p_p$. Индекс p указывает здесь на то, что полученный ПП является дырочным полупроводником (positive semiconductor, pПП, ПП p-типа). Зонная схема ПП p-типа показана на рис. 23.2. В pПП в запрещённой зоне расположены локальные энергетические уровни атомов акцепторной примеси (они показаны штрихами). На рисунке изображён случай мелкой примеси ($W_a \ll W_g$). Зонная диаграмма, представленная на рис. 23.2, *а*, соответствует очень низкой температуре.

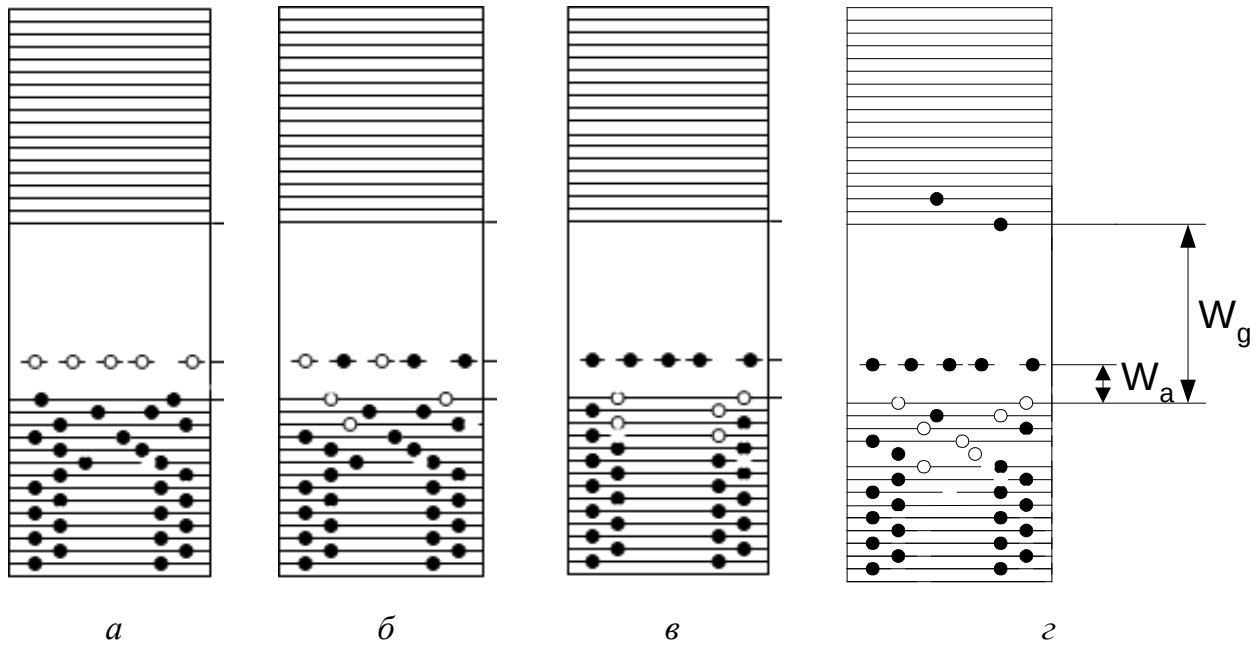

Рис. 23.2. Зонные диаграммы дырочного ПП при разных температурах:
а – очень низкая температура; *б* – низкая температура;
в – средняя температура – примесное истощение; *г* – высокая температура

При увеличении температуры часть атомов примеси ионизуется: чёрные кружочки на примесных уровнях – это «бывшие» электроны проводимости, которые теперь захвачены атомами акцепторной примеси. Эти атомы превратились в результате в отрицательные ионы, которые локализованы в узлах кристаллической решётки и не дают вклада в проводимость ПП.

Какая бы примесь и в какой концентрации ни была бы внесена в ПП, концентрации носителей тока в нём связаны законом действующих масс:

$$np = n_i^2. \tag{23.1}$$

Здесь концентрация дырок p, концентрация электронов проводимости n и концентрация n_i берутся для одной и той же температуры. Последняя есть концентрация электронов проводимости в том iПП, легированием которого получен данный примесный ПП. Для iПП закон действующих масс переходит в тождество.

Мы видим, что хотя собственная проводимость на практике не используется, количественные соотношения, характеризующие её, очень важны: ведь собственная проводимость – это «фон», на котором разворачивается «действие» – протекание электрического тока через примесный ПП.

Аналитически найти концентрации носителей тока в примесном ПП удаётся в двух предельных случаях. Первый – полное примесное истощение, все атомы примеси ионизованы. Тогда концентрации основных и неосновных носителей в nПП определяются законом действующих масс и формулой

$$n = N_d + p. \tag{23.2}$$

Соответственно, концентрации основных и неосновных носителей в pПП в случае полного примесного истощения вычисляются по закону действующих масс и по формуле

$$p = N_a + n. \tag{23.3}$$

Второй предельный случай – небольшая часть атомов примеси ионизована. Тогда концентрация основных носителей вычисляется по формулам:

$$n_n = \sqrt{N_d N_c} \exp\left(-\frac{W_d}{2k_B T}\right), \tag{23.4}$$

$$p_p = \sqrt{N_a N_\mathrm{v}} \exp\left(-\frac{W_a}{2k_B T}\right), \tag{23.5}$$

а концентрация неосновных носителей – по закону действующих масс. Заметьте, что формулы, полученные для двух предельных случаев, когда примесь полностью ионизована и когда она слабо ионизована, друг в друга не переходят. N_c и N_v определены формулами (22.3) и (22.4).

Температуру T_{sd}, при которой достигается истощение донорной примеси, можно оценить по формуле

$$T_{sd} \approx \frac{W_d}{k_B \ln\left(\frac{2N_c}{N_d}\right)}. \tag{23.6}$$

ПП резистор, в котором используется высокая чувствительность сопротивления ПП к изменению его температуры, называется терморезистором. Одной из главных характеристик терморезистора является его температурный коэффициент сопротивления α_R, определением которого служит формула

$$\alpha_R(T) = \frac{1}{\rho_R(T)} \frac{d\rho_R(T)}{dT}. \tag{23.7}$$

В простейшем случае терморезистор можно изготовить из любого примесного ПП, если в области рабочих температур имеет место примесное истощение, а температура влияет только на составляющую, связанную с собственной проводимостью. Альтернатива состоит в том, чтобы использовать зависимость от температуры концентрации носителей, которая получается за счёт ионизации примеси. Тут важно, чтобы при рабочей температуре ионизация примеси была небольшой, а собственной проводимостью можно было бы пренебречь [20].

В любом из этих случаев для установления зависимости $\rho_R(T)$ надо использовать микроскопическую формулу для плотности тока и закон Ома в дифференциальной форме. При дифференцировании в формуле (23.7) следует пренебрегать любой зависимостью от температуры, кроме той, которая стоит в показателе экспоненты. Типичное (реальное) значение температурного коэффициента сопротивления для ПП терморезисторов варьируется от $-0{,}02$ до $-0{,}08$ К^{-1}. Это примерно на порядок больше, чем для металлов ($\alpha_R \approx 0{,}0035$ К^{-1}).

Задания для самостоятельного выполнения

23.1. Вычислите концентрацию электронов проводимости и дырок в кремнии, легированном фосфором (концентрация примеси 10^{10} см$^{-3}$) при температуре 300 К в случае полного примесного истощения.

23.2. Вычислите концентрацию электронов проводимости и дырок в германии, легированном алюминием (концентрация примеси 10^{13} см$^{-3}$) в случае полного примесного истощения при температуре 400 К.

23.3. Найдите минимальную концентрацию донорной примеси в кремнии, которая обеспечивает стабильную концентрацию носителей тока (с точностью 10 %) в диапазоне температур от –30 до +30 °С.

23.4. При какой температуре концентрация носителей тока в фосфиде индия с i-типом проводимости равна концентрации дырок в фосфиде галлия,

легированном алюминием, при комнатной температуре (300 К). Уровень легирования фосфида галлия таков, что дырок в нём в 10^3 раза больше, чем электронов проводимости. Возможно, придётся использовать метод итераций.

23.5. Кристалл фосфида индия размерами $10 \times 20 \times 1{,}5$ мм^3 содержит $5 \cdot 10^{18}$ атомов донорной примеси, энергия активации которой 0,034 эВ. Определите концентрации основных и неосновных носителей тока при температуре -20 °С.

23.6. Определите температурный коэффициент сопротивления для кремния i-типа при температуре 310 К.

23.7. Определите температурный коэффициент сопротивления для кремния, легированного бором при температуре 310 К. На каждый атом примеси приходится 10^{12} атомов кремния.

24. КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ПОЛУПРОВОДНИКОВ РАЗНЫХ ТИПОВ

Современный транзистор, являющийся элементом микросхемы любого смартфона, имеет типичный размер от 50 до 10 нм, т. е. является наноразмерным объектом. Когда два кристалла с разными концентрациями носителей тока «приводятся» в контакт, то за счёт хаотического движения возникает кратковременный диффузионный ток через границу раздела. Этот ток приводит к образованию двойного электрического слоя (ДЭС) в приграничной области. Поле этого слоя, который напоминает плоский конденсатор, уравновешивает диффузионный ток. Толщина ДЭС тем меньше, чем больше концентрация носителей тока. Условием установления равновесного профиля концентрации носителей тока является равенство электрохимических потенциалов (энергий Ферми, если их отсчитывать от вакуума, см. раздел 18).

Когда контактируют два металла, между ними возникает контактная разность потенциалов (КРП), которая равна разности работ выхода, делённой на элементарный заряд. Именно благодаря КРП работают все батарейки (элементы питания).

Если контактируют вещества с сильно различающимися концентрациями носителей тока, то бóльшая часть области приконтактного поля оказывается локализована в веществе с меньшей концентрацией. Эта область сильно обеднена носителями, и сопротивление такого контакта сильно зависит от полярности приложенного напряжения. Это свойство часто называют односторонней проводимостью. Оно используется в полупроводниковых диодах для преобразования переменного напряжения в постоянное, т. е. для выпрямления тока.

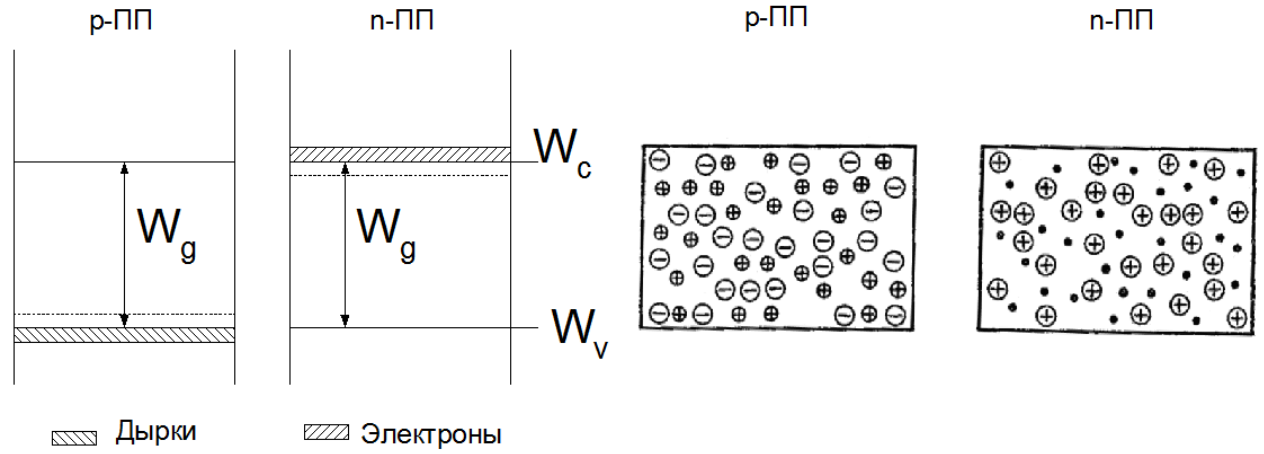

Рис. 24.1. «Будущий» p–n-переход при отсутствии контакта: области с разными типами проводимости уже созданы в ПП с шириной запрещённой зоны W_g, но ещё не приведены в контакт (модельная ситуация). После приведения в контакт электроны проводимости (чёрные точки) диффундируют налево, а дырки (маленькие кружки с плюсиками) – направо

Ярким примером контакта является область в ПП, где один тип проводимости сменяется другим, так называемый p–n-переход [9, 10]. Благодаря диффузии электронов проводимости в p-область она заряжается отрицательно, а n-область оказывается заряженной положительно. Этот про-

цесс является частным случаем релаксации. Он продолжается до тех пор, пока не сравняются одночастичные уровни энергии акцепторов в p-области и доноров в n-области (энергии этих уровней практически совпадают с энергией Ферми). В результате возникающий потенциальный барьер имеет высоту, примерно равную ширине запрещенной зоны. Это выполняется для случая мелких примесей. Сказанное иллюстрируется рис. 24.1–24.2.

Энергия электронов (основных носителей справа) уменьшилась в n-ПП: туда пришли дырки, рекомбинировали с электронами проводимости, и остался нескомпенсированным заряд положительных ионов донорной примеси. Это уже более реальная ситуация, равновесная.

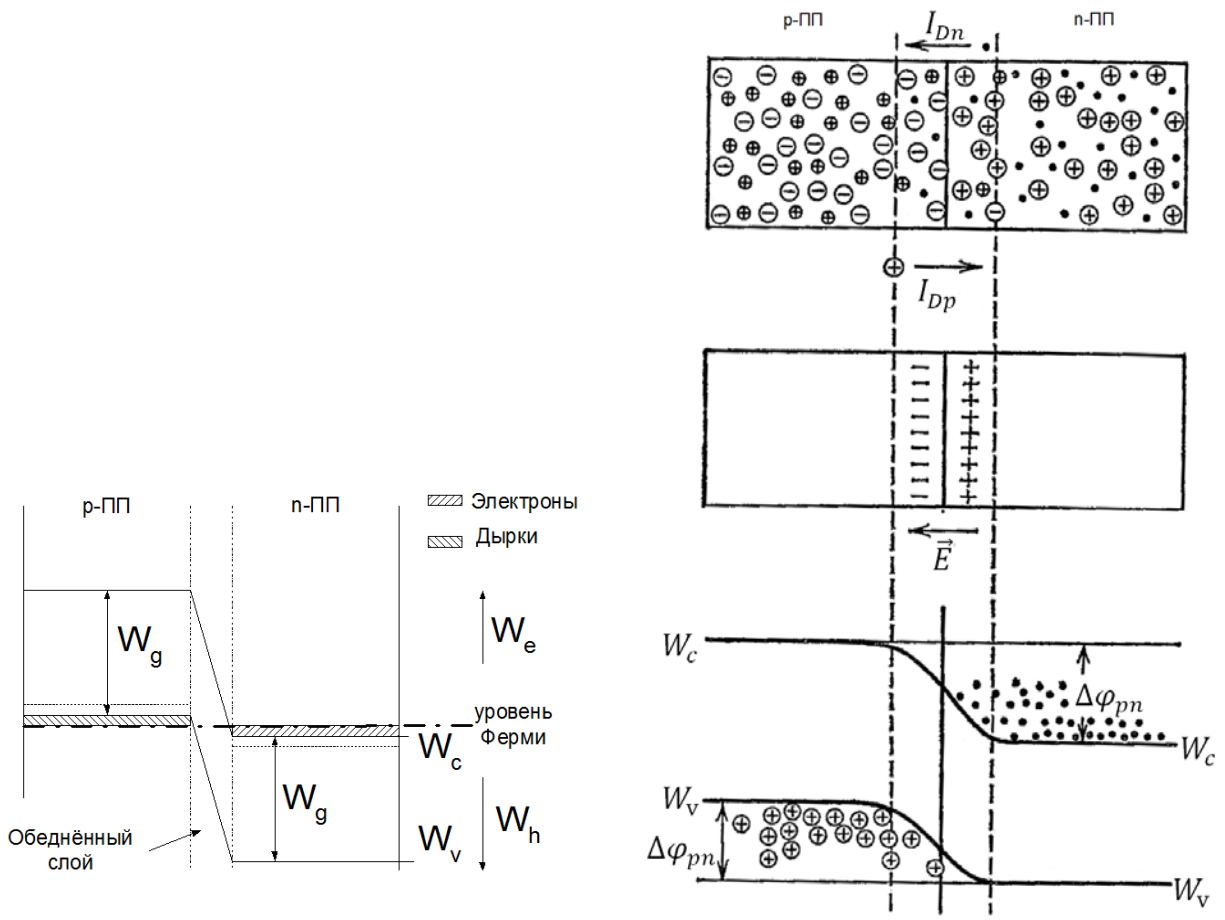

Рис. 24.2. P–n-переход в равновесии при отсутствии смещения.
На рисунке справа показаны диффузионные токи (I_{Dn} – ток электронов проводимости из n-области в p-область и I_{Dp} – ток дырок из p-области в n-область) и разность потенциалов φ_{pn}, установившаяся между n- и p-областями

Когда на n-область подается отрицательный потенциал (относительно p-области!), энергия электронов в n-области увеличивается и барьер (или, скорее, порог потенциальной энергии) становится ниже (см. рис. 24.3) [20]. Потенциальная энергия в зависимости от горизонтальной координаты x меняется, конечно, более плавно, чем при отсутствии смещения.

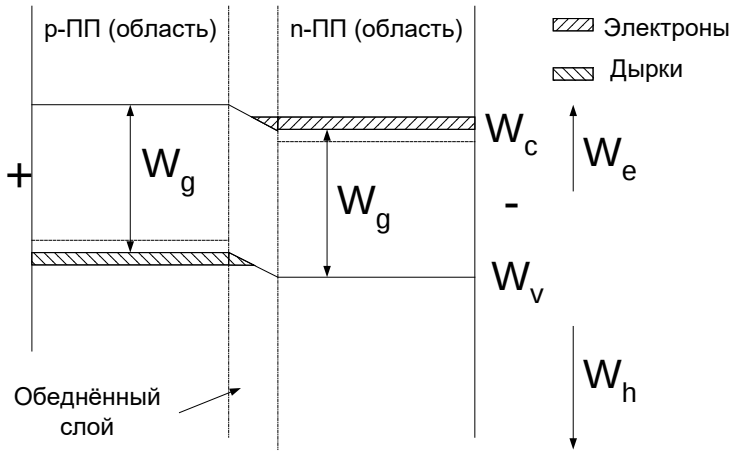

Рис. 24.3. P–n-переход при сильном прямом смещении

Равновесие, установившееся в p–n-переходе, является динамическим, т. е. через p–n-переход течёт несколько токов, которые при отсутствии смещения компенсируют друг друга. Это диффузионные токи основных носителей и полевые токи неосновных носителей. Сумма дырочного тока из n-области в p-область и электронного тока в обратном направлении называется током насыщения. Плотность этого тока можно рассчитать по формуле

$$j_s = en_i^2\left(\frac{1}{N_a}\sqrt{\frac{2D_e}{\tau_{ep}}} + \frac{1}{N_d}\sqrt{\frac{2D_h}{\tau_{hn}}}\right). \qquad (24.1)$$

В формуле (24.1) τ_{ep} – время жизни электрона проводимости в p-области; τ_{hn} – время жизни дырок в n-области. Формула (24.1) является результатом моделирования процесса диффузии через границу раздела ПП разных типов с помощью уравнения диффузии.

Если p-область легирована намного сильнее, чем n-область, то первое слагаемое в скобках в формуле (24.1) пренебрежимо мало.

Хотя ток насыщения определяется неосновными носителями, он является важнейшим ингредиентом ВАХ ПП диода. Эта характеристика выражается формулой

$$I = I_s\left[\exp\left(\frac{eU}{k_B T}\right) - 1\right]. \tag{24.2}$$

Здесь U – напряжение на p–n-переходе. Оно может сильно отличаться от напряжения, приложенного к ПП диоду как техническому устройству, особенно в случае прямого смещения.

Для асимметричного p–n-перехода толщина области объёмного заряда Δx и максимальная напряжённость электрического поля в двойном электрическом слое E_m могут быть вычислены по формулам:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{2W_g \varepsilon\varepsilon_0}{e^2 N_d}}, \tag{24.3}$$

$$E_m = \sqrt{\frac{2W_g N_d}{\varepsilon\varepsilon_0}}. \tag{24.4}$$

При выводе этих модельных формул считается, что p-область легирована гораздо сильнее n-области и что внешнее постоянное напряжение (смещение) отсутствует. При наличии этого смещения (внешней разности потенциалов U) обе эти формулы можно использовать, заменив W_g на $W_g - eU$. Случай асимметричного p–n-перехода иллюстрирует рис. 24.4.

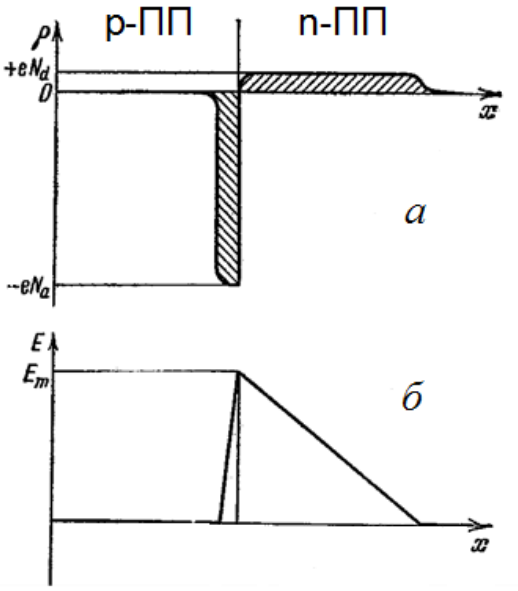

Рис. 24.4. Характеристики p- и n-областей вблизи контакта:
а – плотность электрического заряда; *б* – модуль напряжённости электрического поля (НЭП) как функции координаты x, которая перпендикулярна плоскости контакта p- и n-областей

Область p легирована намного сильнее, поэтому плотность заряда отрицательных ионов акцепторной примеси в ней $(-eN_a)$ намного больше по модулю. Разумеется, полные объёмные заряды p- и n-областей (заштрихованные площади) по модулю одинаковы. Электрическое поле сосредоточено, в основном, в слаболегированной n-области.

Задания для самостоятельного выполнения

24.1. Рассчитайте ширину p–n-перехода в кремнии при отсутствии смещения. Концентрация доноров $12 \cdot 10^{16}$ м$^{-3}$, а концентрация акцепторов $60 \cdot 10^{15}$ м$^{-3}$.

24.2. Определите ширину прямосмещённого p–n-перехода в фосфиде индия при концентрации доноров $18 \cdot 10^{12}$ см$^{-3}$ и концентрации акцепторов $30 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$. Величина смещения 130 мВ.

24.3. Определите максимальную напряженность электрического поля в p–n-переходе в германии при отсутствии смещения, если концентрация доноров составляет $50 \cdot 10^{8}$ мм$^{-3}$, а концентрация акцепторов $30 \cdot 10^{6}$ мм$^{-3}$.

24.4. Рассчитайте плотность тока насыщения через GaAs p–n-переход при температуре 320 К, если концентрация акцепторов $50 \cdot 10^5$ мм$^{-3}$, а концентрация доноров составляет $30 \cdot 10^8$ мм$^{-3}$.

24.5. Площадь p-n-перехода германиевого диода с p-эмиттером равна 10 см^2. Необходимо обеспечить ток силой 1,0 А через диод при напряжении 150 мВ на p–n-переходе при 300 К. Какова минимальная концентрация донорной примеси, необходимой для этого?

24.6. P–n-переход, находящийся при температуре –15 °С под обратным напряжением в 150 мВ, имеет сопротивление 1,2 кОм. Каково сопротивление этого перехода при таком же прямом напряжении, при той же температуре?

24.7. Сопротивления p–n-перехода, находящегося под напряжением 20 мВ, при подключениях с разной полярностью равны 5,5 Ом и 1,5 кОм. Какова температура этого p–n-перехода?

25. СВЕТОДИОДЫ

В наше время (2022 г.) с такими наноструктурами, как светодиоды, сталкивается в повседневной жизни большинство жителей России. В самом деле, аббревиатуру LED видел почти каждый. Светодиод представляет собой прямосмещённый электронно-дырочный (p–n) переход.

Такой переход реализуют, слабо легируя кристалл сначала донорной примесью, а потом сильно (поверх предыдущей, но на меньшую глубину) – акцепторной примесью. За счёт хаотического движения немедленно возникает диффузионный ток через границу раздела n- и p-полупроводников. В результате в приграничной области образуется двойной электрический слой, поле которого уравновешивает диффузионный ток. Толщина этого слоя тем меньше, чем больше концентрация носителей тока. Условием равновесия является равенство энергий Ферми, т. е. электрохимических потенциалов (см. рис. 18.1) [20].

Чтобы прямосмещённый электронно-дырочный (p–n) переход работал как светодиод, параметры перехода подбирают так, чтобы электроны проводимости и дырки рекомбинировали в области двойного электрического слоя, испуская фотоны. Энергия такого фотона равна ширине запрещённой зоны. Современные светодиодные лампы, испускающие белый свет, получают, комбинируя светодиоды, испускающие фотоны, частоты (цвет) которых взаимно дополняют друг друга (красный, зелёный, синий).

Первые светодиоды (1962 г.) испускали инфракрасное излучение. Такие светодиоды использовались (да и сейчас используются) в пультах дистанционного управления телевизорами и другими электронно-бытовыми приборами.

Особенно долго не удавалось получить светодиод, дающий синий свет. За преодоление этой трудности японские учёные Исаму Акасаки, Хироси Амано и Сюдзи Накамура были удостоены Нобелевской премии по физике в 2014 г. Разумеется, сами работы по «синему диоду» были выполнены намного раньше – в 1993 г.

Для дальнейшего чтения рекомендуем
https://en.wikipedia.org/wiki/Light-emitting_diode.

Задания для самостоятельного выполнения

25.1. К какому диапазону принадлежит свет, испускаемый светодиодом на основе кремния?

25.2. К какому диапазону принадлежит свет, испускаемый светодиодом на основе германия?

25.3. Определите максимальную напряженность электрического поля в p–n-переходе в германии при отсутствии смещения, если концентрация доноров составляет $50 \cdot 10^8$ мм$^{-3}$, а концентрация акцепторов $30 \cdot 10^6$ мм$^{-3}$.

25.4. Площадь p–n-перехода германиевого диода с p-эмиттером равна 10 см^2. Необходимо обеспечить ток силой 1,0 А через диод при напряжении 150 мВ на p–n-переходе при 300 К. Какова минимальная концентрация донорной примеси, необходимой для этого?

26. КВАНТОВЫЕ ЯМЫ, НИТИ, ТОЧКИ

Одна из наиболее изученных квантовых наноструктур – квантовая яма. Это структура, в которой тонкий (несколько нанометров) слой одного полупроводника помещён между двумя толстыми (несколько микрометров) слоями другого полупроводника. Ниже (на рис. 26.1) тонкий слой обозначен номером II, а толстые – номерами I и III [22].

Такая структура называется гетероструктурой, поскольку полупроводники разные. Существенно, что оба полупроводника должны иметь близкие по строению кристаллические решётки, чтобы на границе раздела не возникали дефекты. Впервые получить хорошие (с малым количеством дефектов) гетероструктуры удалось советскому учёному Жоресу Ивановичу Алфёрову в 1960-х гг. За эти работы он был удостоен Нобелевской премии по физике в 2000 г.

Наиболее изучена гетероструктура $\mathrm{Al_xGa_{1-x}As} - \mathrm{GaAs}$. Здесь $x < 1$ показывает, какая доля атомов галлия (порядковый номер в Периодической таблице 31) заменена на алюминий (порядковый номер 13); обычно $0{,}15 < x < 0{,}35$. Ширина запрещённой зоны внутреннего слоя, W_{gII} = 1,5 эВ, меньше, чем ширина запрещённой зоны материала $\mathrm{Al_xGa_{1-x}As}$, который образует внешние слои, – W_{gI}. При $x = 1$, т. е. в полупроводнике AlAs, ширина запрещённой зоны $W_{g0} = 2{,}2$ эВ. Понятно, что при $x < 1$ получается $W_{gII} < W_{gI} < W_{g0}$.

На рисунке 26.1 показана энергетическая диаграмма квантовой ямы: по вертикали отложена энергия электрона, а по горизонтали – координата, перпендикулярная слоям. Видно, что зона проводимости внутреннего слоя представляет собой потенциальную яму глубины $W_{cI} - W_{cII}$ для электронов, движение которых вдоль оси z (рис. 26.1) стало финитным, и соответственно возникли определённые уровни энергии.

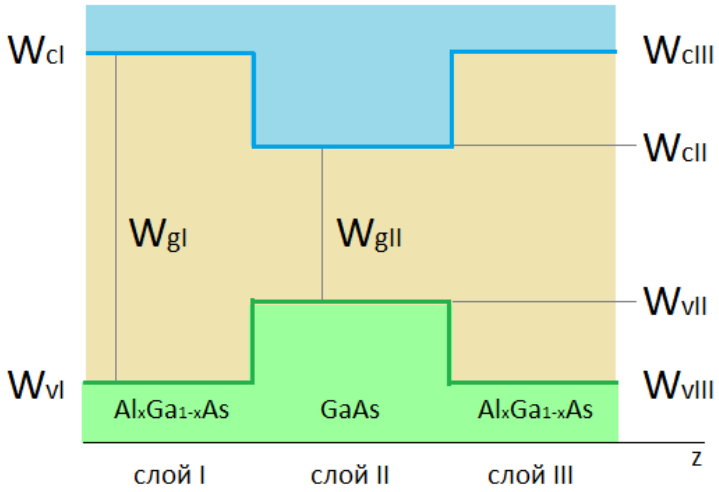

Рис. 26.1. Зонная диаграмма гетероперехода $\mathrm{Al_xGa_{1-x}As} - \mathrm{GaAs}$

Энергию электрона в такой яме можно оценить с помощью известной формулы для БГОППЯ:

$$W_n = W_0(n+1)^2. \tag{26.1}$$

Здесь W_0 – энергия «основного» состояния, т. е. состояния с минимальной энергией, отвечающей движению вдоль оси z в яме. Она определяется шириной ямы b и массой частицы. В роли частицы в нашем случае выступает квазичастица – электрон проводимости с эффективной массой m_e^*. Она заметно меньше массы реального электрона m_e: $m_e^* \cong 0{,}1m_e$. Дело здесь в том, что в m_e^* отражается взаимодействие электрона с кристаллической решёткой. Итак,

$$W_0 = \left(\frac{\pi\hbar}{b}\right)^2 \frac{1}{2m_e^*}. \tag{26.2}$$

Ширина ямы b есть, по сути дела, толщина слоя II, которую мы можем менять в заметных пределах. Принимая $b = 5$ нм, получаем $W_0 \cong 0{,}15$ эВ.

Поскольку яма имеет конечную глубину, то и число уровней в ней конечно в противоположность БГОППЯ. Глубину ямы можно подобрать так, что в ней будет всего два уровня: W_0 и W_1. Если «забросить» электрон на уровень 1, то при последующем переходе вниз, в основное состояние, получим излучение, близкое к монохроматическому. Примерно так работают некоторые полупроводниковые источники света.

Технически квантовые ямы изготавливают, нанося друг на друга слои разных материалов методом молекулярной эпитаксии. Несколько потоков атомов, которые получают испарением с отдельных нагретых источников, одновременно летят на подложку и оседают на ней. Чтобы избежать загрязнения, выращивание плёнки проводят в глубоком вакууме (около 1 нанаторра). Весь процесс управляется компьютером, химический состав плёнки и её структура контролируются в процессе роста. Такой метод позволяет выращивать слои толщиной в несколько периодов решётки.

Первое реальное устройство с квантовой ямой и барьерами – резонансный туннельный диод – было создано американским физиком японского происхождения Лео Ёсаки в 1957 г. (Нобелевская премия по физике 1973 г.).

Если ограничить движение электронов в направлении, перпендикулярном оси z, например в направлении y, то свобода движения останется у них только вдоль оси x, а в плоскости yz их движение будет финитным. Получившаяся квантовая наноструктура носит название квантовой нити. Её можно получить на дне V-образной канавки, сформированной на полупроводниковой подложке. Для этого на дне канавки осаждают полупроводник с меньшей шириной запрещённой зоны. Тогда его электроны проводимости оказываются запертыми в двух направлениях.

Наконец, если ограничить движение электронов и в направлении x, то финитным будет движение по всем трём осям. Получившаяся квантовая

наноструктура носит название квантовой точки и представляет собой фактически искусственный атом. Задавая размеры этого «атома», мы можем получать ту или иную длину волны его излучения.

Технологически для этого используют всё ту же гетероструктуру I-II $Al_xGa_{1-x}As - GaAs$. В процессе её выращивания в материал I вводят дополнительные примесные атомы, которые образуют островок вблизи границы раздела I-II. Электроны из этого островка уходят в область II, так как там их энергия меньше. Однако сам островок заряжается при этом положительно, и электроны далеко от него уйти не могут. Получается такая трёхслойная структура, в которой движение электронов ограничено по одной оси, в сущности – квантовая яма. Дальше методом фотолитографии формируют цилиндрические структуры, которые показаны на рис. 26.2.

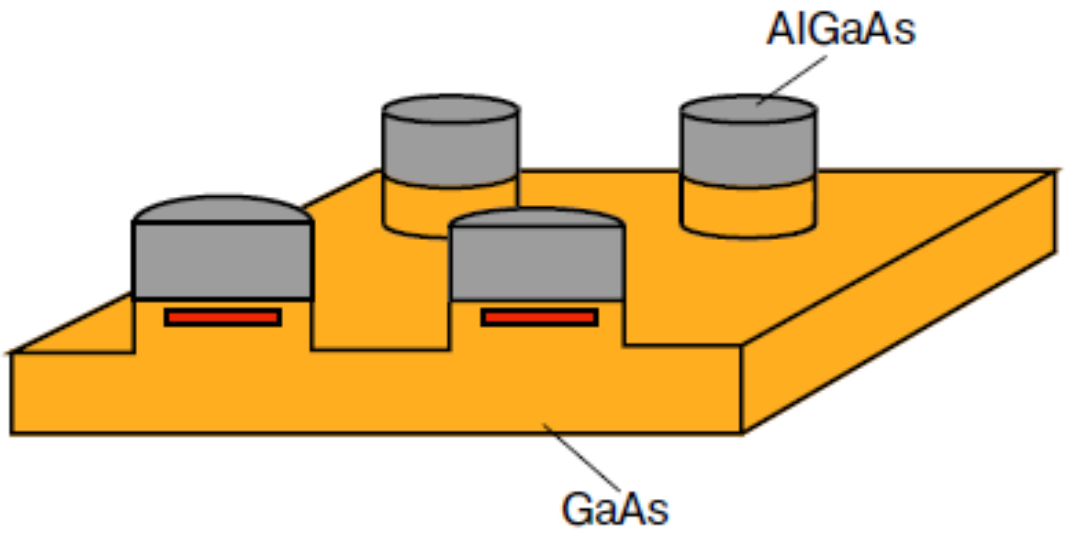

Рис. 26.2. Квантовые точки, сформированные в двумерном электронном газе на границе двух ПП

Электроны (островки красного цвета) оказываются запертыми в этих цилиндрах, радиус которых порядка 500 нм, а размер островка по вертикали – несколько нанометров. Одна квантовая точка может содержать один или несколько электронов.

При переходах электронов с верхних уровней на нижние испускается свет (электромагнитное излучение). Изменяя размер квантовой точки, можно изменять длину волны излучения. Таким образом, квантовая точка представляет собой как бы искусственный атом. Возбуждение такого атома осуществляется с помощью ультрафиолетового излучения. Само явление испускания света в такого рода процессах носит название «фотолюминесценция».

Квантовые точки размером 5–6 нм считаются большими; они испускают красное или оранжевое излучение. Маленькие квантовые точки размером 2–3 нм испускают голубой или зелёный свет.

Пока (2022 г.) в литературе в основном обсуждаются потенциальные применения этих наноструктур. Квантовые точки могут применяться в лазерах, светодиодах, одноэлектронных транзисторах, для получения изображений в медицине, для реализации квантовой криптографии.

Для дальнейшего чтения рекомендуем
https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_dot

Задания для самостоятельного выполнения

26.1. Сколько атомов галлия содержится в сферической квантовой точке радиусом 4,5 нм? Точка сформирована из материала GaAs.

26.2. Квантовая точка испускает импульс монохроматического излучения длиной волны 450 нм, энергия импульса 320 нДж. Сколько фотонов содержится в этом импульсе?

26.3. Какова должна быть ширина квантовой ямы, чтобы она испускала синий свет (длина волны 430 нм) при переходе электрона из первого возбуждённого состояния в основное? Эффективная масса электрона проводимости составляет 17 % от m_e.

27. СПИНТРОНИКА: ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

Обычно магнитное поле слабо влияет на электропроводность: в поле с индукцией 10 Тл электропроводность однородного металлического образца при комнатной температуре изменяется на доли процента по сравнению с электропроводностью при отсутствии магнитного поля. Однако в гетерогенных образцах это влияние может быть более заметным. В 1988 г. две исследовательские группы под руководством П. Грюнберга (г. Юлих, ФРГ) и А. Ферта (г. Париж, Франция) обнаружили, что в искусственном веществе, состоящем из нескольких слоёв железа и хрома, электрическое сопротивление подавляется почти вдвое магнитным полем [23, 24]. В 2007 г. за открытие этого явления, названного гигантским магнетосопротивлением (ГМС), П. Грюнберг и А. Ферт получили Нобелевскую премию.

Явление ГМС иллюстрируется рис. 27.1 и 27.2. Сначала выращивается многослойная структура (сверхрешётка), в которой слои ферромагнитного металла (железо) разделены слоями неферромагнитного металла (хром). Такая структура показана на рис. 27.2. Соседние слои железа намагничены поразному: один слой намагничен очень сильно и представляет собой постоянный магнит («неподвижный слой»), а ближайший к нему слой железа может легко менять свою намагниченность под действием внешнего поля («подвижный слой»). Прослойка хрома нужна, чтобы исключить непосредственное взаимодействие между слоями железа с разной намагниченностью. Слои должны быть очень тонкими (их толщина указана на рис. 27.1), так что выращивание таких структур относится к нанотехнологиям.

Почти сразу после открытия стало понятно, что это явление можно использовать для считывания информации с жёстких дисков компьютеров и вообще с магнитных носителей. В настоящее время именно это явление применяется в большинстве жёстких дисков для считывания информации. До применения ГМС (1997 г.) типичная плотность записи информации со-

ставляла 1 Гбит/кв. дюйм. В устройствах, использующих ГМС (2007 г.), плотность записи удалось увеличить до 300 Гбит/кв. дюйм.

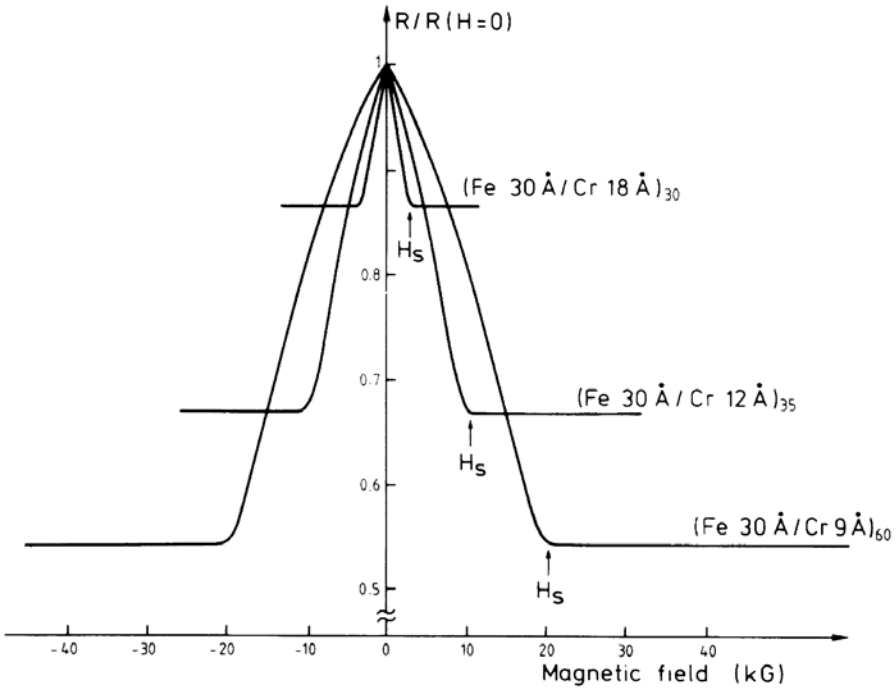

Рис. 27.1. Зависимость относительного сопротивления трёх образцов от магнитной индукции (1 Гс (один гаусс) = 100 мкТл). Рисунок взят из оригинальной нобелевской работы А. Ферта. По горизонтали отложена магнитная индукция, а по вертикали – отношение сопротивлений

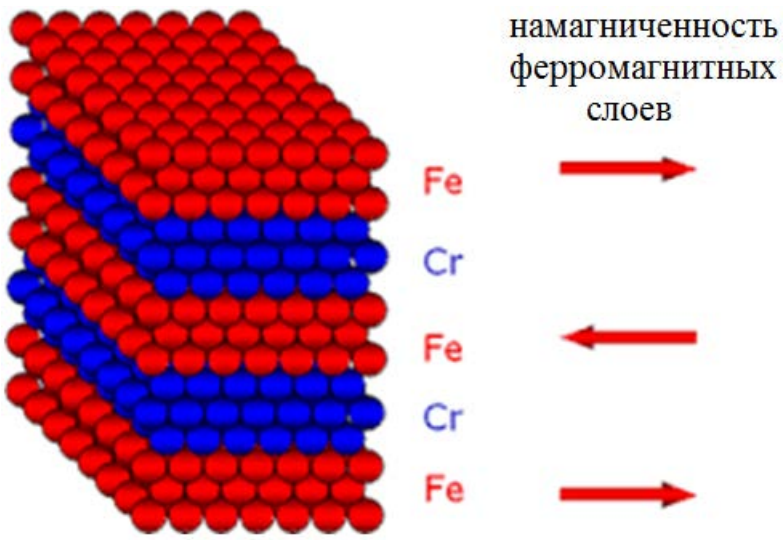

Рис. 27.2. Многослойная структура (сверхрешётка), в которой впервые наблюдалось явление ГМС

Гигантское магнетосопротивление лежит в основе элементов магниторезистивной оперативной памяти (MRAM). Такие устройства хранят информацию в виде ориентированных магнитных дипольных моментов, а не электрических зарядов, как в обычной (полупроводниковой) RAM. Важнейшее преимущество MRAM состоит в том, что она является энергонезависимой (как и память жёсткого диска), в то время как вся информация на RAM стирается при отключении питания. Сторонники MRAM убеждены, что со временем она станет универсальной компьютерной памятью и вытеснит все другие типы.

Магнитные элементы MRAM сформированы из двух ферромагнитных слоёв, разделенных тонким слоем диэлектрика. Один из слоёв представляет собой постоянный магнит, намагниченный в определённом направлении, а намагниченность другого слоя изменяется под действием внешнего поля. Устройство памяти организовано по принципу сетки, состоящей из отдельных «ячеек», содержащих элемент памяти и транзистор.

Считывание информации осуществляется измерением электрического сопротивления ячейки. Отдельная ячейка обычно выбирается подачей питания на соответствующий ей транзистор, который подаёт ток от источника питания через ячейку памяти на общую землю микросхемы. Вследствие эффекта туннельного магнетосопротивления электрическое сопротивление ячейки изменяется в зависимости от взаимной ориентации намагниченностей в слоях. По величине протекающего тока можно определить сопротивление данной ячейки и, как следствие, полярность перезаписываемого слоя. Обычно одинаковая ориентация намагниченности в слоях элемента интерпретируется как «0», в то время как противоположное направление намагниченности слоёв, характеризующееся более высоким сопротивлением, – как «1». Подробнее о MRAM можно прочитать в Википедии в статье «Магниторезистивная оперативная память».

Остановимся теперь на физике явления. В настоящее время это уже целая отрасль физикотехники, которая называется спинтроникой. Как известно, электрон имеет заряд и спин (а значит, и магнитный момент). До открытия явления ГМС вся электроника оперировала с зарядом электрона, а спин просто игнорировался. В то же время магнитная запись информации опиралась на спин электрона, напрочь игнорируя его заряд. Механизм явления ГМС состоит в том, что воздействие магнитного поля на спин электронов приводит к изменению их подвижности, а стало быть, влияет на перемещение электронов в пространстве, т. е. на электрический ток.

Электроны проводимости ферромагнитного металла, попадая во внешнее магнитное поле, ориентируют свои спины либо по полю, либо против него. Это взаимодействие приводит к расщеплению зоны проводимости на две зоны, и электроны в разных зонах могут иметь заметно разную подвижность. Эксперименты Ферта и Грюнберга показали, что подвижность электронов проводимости ферромагнетика, магнитный момент которых ориентирован так же, как и его намагниченность, заметно больше, чем у электронов проводимости, чей магнитный момент ориентирован противоположно. Таким образом, изменяя намагниченность подвижного слоя, можно управлять сопротивлением всей структуры.

Задания для самостоятельного выполнения

27.1. Сколько атомов железа требуется для хранения одного бита информации при использовании «слойки», показанной на рис. 27.2, с параметрами материала, отмеченными индексом 30 на рис. 27.1? Плотность записи будем считать равной 200 Гбит / кв. дюйм.

27.2. Как и во сколько раз различаются энергия магнитного взаимодействия электрона с магнитным полем 15 кГс и энергия теплового хаотического движения этого электрона при комнатной температуре?

28. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

В 1908 г. Х. Камерлинг-Онесс научился получать жидкий гелий, т. е. появилась возможность охлаждать вещества до $T = 4$ К. Вскоре он обнаружил, что при температуре около 7 К свинец полностью теряет электрическое сопротивление. Это явление было названо сверхпроводимостью (СП), а первооткрыватель получил Нобелевскую премию 1913 г.

Таблица 28.1

Элементные сверхпроводники, их критическая температура и критическое магнитное поле

Элемент	T_c, К	H_c, Э	Элемент	T_c, К	H_c, Э	Элемент	T_c, К	H_c, Э
Al	1,1796	104,9	Mo	0,92	98	Th	1,374	162
Be	0,0237	–	Nb	9,3	1980	Ti	0,42	56
Cd	0,519	29,6	Os	0,66	65	Tl	2,38	179,5
Ga	1,091	58,9	Pa	1,4	–	Tc	7,8	14,10
Hg	4,153	390	Pb	7,1999	803,4	U	1,8	–
In	3,4145	289	Re	1,698	198	V	5,46	11,67
Ir	0,100	20,1	Ru	0,493	47	W	0,015	1,07
La	4,88	808	Sn	3,722	308	Zn	0,851	52
Lu	0,1	–	Ta	4,66	831	Zr	0,53	47,7

Примечание. 1 эрстед (Э) $= 1000/(4\pi)\ A/\text{м} \approx 79{,}5774715$ А/м.

Оказалось, что многие металлы (всего около 30 элементов Периодической таблицы, см. табл. 28.1) при понижении температуры тоже переходят в сверхпроводящее состояние. СП была также обнаружена у многих сплавов (табл. 28.2), ряда органических проводников и легированных фуллеренов. Несмотря на то что получение таких низких температур стоит дорого, СП широко применяется для получения сильных магнитных полей с помощью тока, проходящего по сверхпроводящей катушке.

Таблица 28.2

Сверхпроводники, используемые в технике, и их характеристики

Материал	T_c, К	j_c, кА/см^2 (B, Тл) при $T = 4{,}2$ К	B_c, Тл (T, К)
NbTi	9,5–10,5	30–80 (5)	12 (4,2)
Nb_3Sn	18,1–18,5	100–800 (0)	24,5–28 (0)
NbN	14,5–17,8	(2–5)$\cdot 10^4$ (18)	8–13 (4,2)

Первая упрощённая теория сверхпроводимости была разработана в 1935 г. братьями Лондонами. Более общая теория была построена в 1950 г. Л. Д. Ландау и В. Л. Гинзбургом (Нобелевские лауреаты 1962 и 2003 гг). В 1957 г. Дж. Бардин, Л. Купер и Шриффер разработали микроскопическую теорию СП, которая по фамилиям первооткрывателей была названа теорией БКШ. За эту теорию её авторы в 1972 г. были удостоены Нобелевской премии. Основная идея теории состоит в том, что электроны проводимости при охлаждении вещества объединяются в пары (куперовские пары), имеющие нулевой спин. Эти пары – по существу, квазичастицы бозоны – переходят в наинизшее возможное энергетическое состояние, отделённое от первого возбуждённого энергетической щелью. Чтобы возникло электрическое сопротивление, куперовская пара должна разорваться, но для этого не хватает энергии из-за очень низкой температуры.

Поскольку переход в СП состояние происходит при строго определённой температуре T_c, этот переход является фазовым, как плавление металла или превращение ферромагнетика в парамагнетик. Таким образом, при переходе вещества в СП состояние резко меняются не только его электрические, но и магнитные свойства. Если охлаждать образец в постоянном и не очень сильном магнитном поле, то, когда температура достигает критического значения T_c, магнитное поле выталкивается из тол-

щи сверхпроводника (эффект Мейсснера). Физически это можно объяснить тем, что по поверхности начинает течь незатухающий ток, магнитное поле которого полностью компенсирует внешнее магнитное поле. Плотность этого тока приблизительно экспоненциально убывает при удалении от поверхности внутрь сверхпроводника:

$$B(x) = B_0 \exp(-x/\lambda_B). \tag{28.1}$$

Здесь λ_B – глубина проникновения магнитного поля в СП, она имеет порядок величины от сотен до тысяч ангстрем и возрастает, обращаясь в бесконечность при $T \geq T_c$, т. е. поле полностью проникает в образец. Таким образом, для всех СП существует область магнитных полей, в которой одновременно $R = 0$ и $B = 0$. Так как внутри вещества

$$\vec{B} = \mu_0\left(\vec{H} + \vec{J}_m\right), \tag{28.2}$$

то формально можно считать, что в СП состоянии $\vec{J}_m = -\vec{H}$, а следовательно, сверхпроводники имеют нулевую магнитную проницаемость и потому являются «сверхдиамагнетиками».

Вскоре после открытия сверхпроводимости было обнаружено, что она разрушается достаточно сильным магнитным полем и сильным электрическим током. Значения критических магнитных полей H_c и токов I_c возрастают при понижении температуры ниже T_c. Сверхпроводники в зависимости от их поведения во внешнем магнитном поле H разделяются на два типа: сверхпроводники 1-го и 2-го рода (см. рис. 28.1). К сверхпроводникам 1-го рода относятся все элементные сверхпроводники. К сверхпроводникам 2-го рода относится большинство сплавов, переходящих в сверхпроводящее состояние, и все высокотемпературные сверхпроводники. Масштаб по обеим осям на рис. 28.1 одинаков, так что прямая проходит под углом 45°. Это значит, что магнитная индукция внутри СП рав-

на нулю при увеличении напряжённости магнитного поля (МП) от нуля до H_{c1} (см. формулу (28.2)). Если напряжённость МП больше этого значения, то поле проникает в СП 2-го рода.

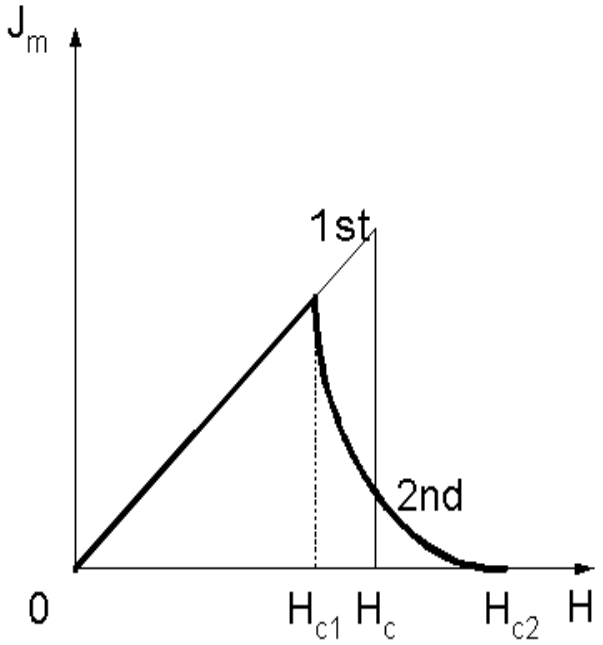

Рис. 28.1. Зависимость намагниченности от напряжённости внешнего магнитного поля для сверхпроводников 1-го и 2-го рода

Для сверхпроводников 2-го рода в области между H_{c1} и H_{c2} средняя магнитная индукция внутри сверхпроводника не равна нулю: внешнее магнитное поле постепенно проникает внутрь сверхпроводника в виде тонких нитей магнитного потока – вихрей Абрикосова. Каждый вихрь имеет нормальную (не сверхпроводящую) сердцевину диаметром 2ξ, через которую проходит магнитное поле. Вокруг сердцевины в слое толщиной λ_B текут вихревые сверхпроводящие токи плотности j_s, экранирующие области с $B = 0$. Магнитный поток, пронизывающий каждый вихрь, имеет строго определённое значение $\Phi_0 = 2{,}07$ фВб (квант магнитного потока). В области между H_{c1} и H_{c2} вещество находится в состоянии, которое представляет собой смесь нормального и сверхпроводящего. При увеличении H число вихрей возрастает, расстояние между ними уменьша-

ется; при $H = H_{c2}$ нормальные сердцевины вихрей соприкасаются, и вещество перестаёт быть сверхпроводником. Этот механизм был теоретически предсказан А. А. Абрикосовым в 1952 г. (Нобелевская премия 2003 г.).

Зависимость критической напряжённости магнитного поля от температуры хорошо описывается формулой

$$H_c(T) = H_{c0}[1 - (T/T_c)^2], \tag{28.3}$$

которую следует использовать при решении задач.

В 1986 г. Г. Мюллер и А. Беднорц обнаружили СП при довольно высокой температуре (около 25 К) у керамики, которая при комнатной температуре вообще является диэлектриком. Это явление было названо высокотемпературной сверхпроводимостью (ВТСП), а первооткрыватели получили Нобелевскую премию по физике 1987 г. В настоящее время получено большое количество веществ, которые переходят в СП состояние при температурах около температуры кипения азота (77 К). По-видимому, явление ВТСП получит в будущем обширное применение.

Задания для самостоятельного выполнения

28.1. Вычислите критическую плотность тока (I_c/S) для цилиндрического свинцового образца длиной 100 мм и радиусом 500 мкм, имеющего температуру 6,0 К.

28.2. Квадратная недеформируемая сверхпроводящая рамка со стороной b расположена горизонтально и находится в неоднородном магнитном поле, индукция которого меняется в пространстве по закону $B_x = -kx$, $B_y = 0$, $B_z = kz + B_0$ (ось z направлена вверх). Масса рамки m, индуктивность L. В начальный момент времени центр рамки совпадает с началом координат, а стороны параллельны осям X и Y. Рамку отпускают. Как она будет двигаться и где окажется в момент времени t?

28.3. Кольцо из ниобиевой проволоки, имеющее температуру 7,5 К, внесли в магнитное поле 10 мТл. Какой ток в результате этого потёк по кольцу? Внутренний радиус кольца 10 мм, радиус проволоки 100 мкм.

28.4. Кольцо из алюминиевой проволоки, имеющее температуру 7,5 К, внесли в магнитное поле 10 мТл. Какой заряд в результате этого протёк по кольцу? Внутренний радиус кольца 10 мм, радиус проволоки 100 мкм.

29. ДЖОЗЕФСОНОВСКИЙ КОНТАКТ

Мы помним, что самые интересные явления возникают, когда контактируют два вещества. Сверхпроводники не должны являться исключением. В 1962 г. Брайан Джозефсон (род. 1940 г.), аспирант Кембриджского университета, теоретически предсказал, что через туннельный сверхпроводящий контакт возможно протекание сверхпроводящего тока. Туннельный СП контакт (так называемый джозефсоновский контакт, ДК) представляет собой два сверхпроводника, разделенные тонким слоем диэлектрика толщиной несколько нанометров. Таким образом, ДК представляет собой типичную квантовую наноструктуру. При пропускании через ДК слабого постоянного тока падение напряжения на ДК отсутствует, т. е. ток чисто сверхпроводящий, без диссипации, электрическое сопротивление при этом отсутствует. Это стационарный эффект Джозефсона, его обнаружили экспериментально уже в 1963 г. Сейчас он широко используется для измерения слабых магнитных полей с помощью СКВИДов (SQUID superconducting quantum interferometer device).

Сила тока I через ДК связана с разностью фаз α куперовских пар слева и справа от непроводящей прокладки:

$$I = I_c \sin(\alpha). \tag{29.1}$$

Из формулы (29.1) видно, что ток через контакт не может превосходить некоторого критического значения I_c, которое определяется параметрами ДК.

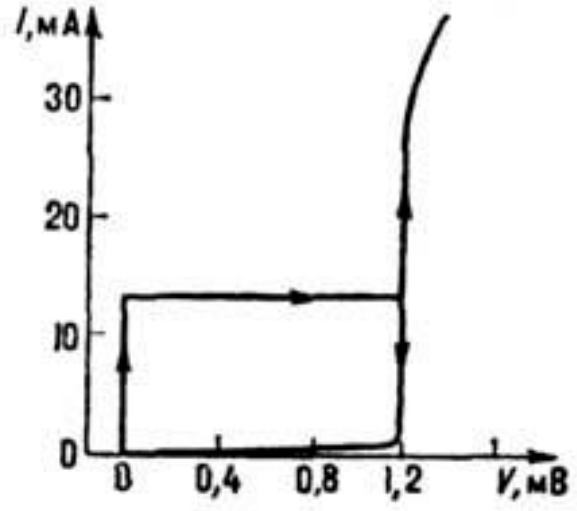

Рис. 29.1. Вольт-амперная характеристика (ВАХ) туннельного контакта Sn-Sn при температуре 1,4 К (прослойка – плёнка оксида олова)

Если ток увеличивать, то при некотором критическом его значении I_{cD} на ДК появляется напряжение, т. е. появляется диссипация. Значение I_{cD} зависит от свойств контакта, от температуры и от внешнего магнитного поля. Ток I_{cD} складывается из тока сверхпроводящих (спаренных) электронов, который теперь становится переменным (его частота зависит от напряжения на ДК), и тока через прослойку нормальных (не сверхпроводящих, не спаренных) электронов [21]. Режим при токе I_{cD} называется нестационарным эффектом Джозефсона.

В нестационарном случае каждая куперовская пара, проходя через ДК, испускает квант электромагнитного излучения (ЭМИ) с энергией $\hbar\omega = 2eU$, где U – напряжение на ДК. При этом напряжение на ДК остаётся постоянным, а ток протекает переменный. Обратный эффект наблюдается тоже: если облучать ДК СВЧ-излучением частоты Ω, удовлетворяющей соотношению $n\hbar\Omega = 2eU$, то прохождение через контакт куперов-

ской пары происходит с поглощением n фотонов внешнего поля. Это приводит к протеканию дополнительного тока через ДК, и на ВАХ появляется участок с нулевым дифференциальным сопротивлением. В принципе, поглощение фотона джозефсоновским переходом может быть использовано для записи информации, а испускание фотона – для её считывания. Таким образом, ДК может быть использован для создания кубита – квантового бита, который будет являться основным элементом квантового компьютера. По-видимому, ДК (точнее, СКВИД) может быть использован и для считывания информации с кубита, в роли которого используется сверхпроводящий контур. Когда ток в контуре изменяется, изменяется и магнитный поток, и это изменение регистрируется СКВИДом.

Другой вариант использования сверхпроводимости в квантовых компьютерах состоит в том, чтобы собирать квантовые регистры из миниатюрных сверхпроводящих колец. Каждое кольцо играет роль кубита, а состояниям 0 и 1 соответствуют направления электрического тока в кольце – по часовой стрелке и против нее. Переключать такие кубиты можно магнитным полем.

Задания для самостоятельного выполнения

29.1. Что такое джозефсоновский контакт?

29.2. Каково напряжение на джозефсоновском контакте, если он поглощает ЭМИ длиной волны 15 мм? Сможет ли этот контакт при этом напряжении поглощать ЭМИ с длиной волны 500 мкм?

30. ФУЛЛЕРЕНЫ

Фуллерен представляет собой молекулу в виде многогранника из атомов углерода, каждый из которых связан ковалентными связями с тремя другими атомами. Возможность существования таких устойчивых структур была предсказана теоретически в 1970 г. японским химиком Еиджи Осава.

В СССР в 1971 г. был проведен квантово-химический расчет стабильности и электронной структуры фуллерена. Этот расчёт был очень сложен для компьютеров того времени, однако его удалось провести. Он показал, что молекула C_{60} является стабильной. К сожалению, авторам расчёта Д. А. Бочвару, Е. Г. Гальперн и И. В. Станкевичу не удалось убедить советских химиков-экспериментаторов синтезировать эту структуру.

В середине 1970-х гг. британский учёный Г. Крото обнаружил по спектральным данным из космоса длинные углеродные молекулярные цепочки. Он решил попытаться получить их в лабораторных условиях. В начале 1980-х гг. в США в Университете Райса, в лаборатории Р. Смолли, была разработана аппаратура для исследования кластеров, образующихся из тугоплавких элементов.

В 1984 г. американский учёный Р. Керл был научным гостем в лаборатории Г. Крото в Университете Сассекса (Великобритания). Керл предложил Крото посетить лабораторию Смолли. Крото был впечатлен возможностями аппаратуры Смолли и предложил заменить металлический диск на графитовый. Целью было получить углеродные цепочки, обнаруженные Крото в оболочках звезд.

В августе 1985 года были получены непонятные пики в масс-спектре для структур из 60 и 70 атомов углерода. Вскоре стало понятно, что это замкнутые структуры, имеющие форму футбольного мяча и мяча для регби. Их структурными элементами можно считать атомы углерода, а можно – пяти- и шестиугольники, состоящие из атомов углерода. Из таких многоугольников состоят слои в хорошо известном графите. В 1996 г. Крото, Керл и Смолли получили за своё открытие Нобелевскую премию по химии.

Позже были открыты фуллерены с числом атомов 20, 72, 74, ...90. Размеры фуллеренов около 1 нм. Оказалось, что можно «сделать» кристалл, структурными элементами которого являются фуллерены. Такой кристалл является полупроводником с шириной запрещённой зоны около 1,5 эВ

со всеми вытекающими последствиями для возможного применения. Фуллерены можно использовать как фоторезисты, поскольку под действием ультрафиолетового излучения они полимеризуются и не растворяются органическими растворителями.

Особый интерес представляют нанотрубки – цилиндрические фуллерены. Диаметры нанотрубок составляют несколько нанометров, так что это «классические» наноструктуры. Длина трубки может варьироваться от микрометров до миллиметров. Нанотрубки обладают высокой прочностью на разрыв, высокой электропроводностью, высокой эластичностью, хорошей теплопроводностью и относительно малой химической активностью.

Одно из обсуждаемых применений нанотрубок – paper battery – бумажные батарейки. Они впервые были получены в 2007 г. Их основой служит бумага, а в качестве электродов используются нанотрубки. Такие батарейки имеют много преимуществ: они не загрязняют окружающую среду, очень гибкие, тонкие, с их помощью можно существенно уменьшить размер устройства, которое их использует. Есть только два недостатка: производство нанотрубок по-прежнему очень сложное и дорогое.

Задания для самостоятельного выполнения

30.1. Что представляет собой фуллерен? Какими особыми свойствами он обладает?

30.2. Где могут быть использованы фуллерены?

31. ГРАФЕН

В 2004 г. Константин Новосёлов и Андрей Гейм в Манчестерском университете (Великобритания) разработали простой и эффективный метод получения моноатомных слоёв, состоящих из углеродных шестиугольников. Такой материал был назван графеном. Схематическое изображение графена представлено на рис. 31.1.

Это позволило сотням лабораторий по всему миру включиться в исследования необычных свойств графена. Оказалось, что графен обладает уникальными физическими свойствами: большой механической жёсткостью, рекордно высокой теплопроводностью и высокой подвижностью электронов. В 2012 г. мировой рынок графена, который уже выступал в роли ценного наноматериала, составлял 9 млн долл. США.

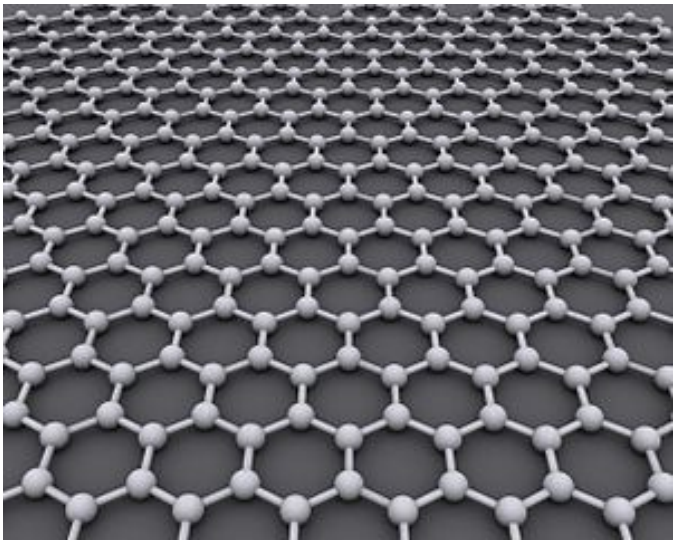

Рис. 31.1. Схематическое изображение графена

Уникальные свойства графена обусловлены четырьмя валентными электронами атома углерода. Три из них формируют химические связи в плоскости материала (на рис. 31.1 видно, что каждый атом связан с тремя другими, длина связи 0,142 нм). Четвёртый электрон занимает p-орбиталь, перпендикулярную плоскости материала. Эти орбитали формируют две электронные зоны, каждая из которых наполовину заполнена свободно движущимися электронами, которые и обусловливают особые электрические свойства графена.

В настоящее время проводятся исследования возможностей использования графена в медицине и биологии. В 2014 г. было показано, что из графена можно изготовить квантовые точки размером около 100 нм со спектром электромагнитного излучения от ультрафиолетового до инфракрасного.

Задания для самостоятельного выполнения

31.1. Каковы механические свойства графена?

31.2. Каковы электрические свойства графена?

31.3. Где и как может быть использован графен?

32. ДЕЛЕНИЕ ЯДЕР – ОСНОВА ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Ядерная энергия используется главным образом на атомных электростанциях (АЭС), которые правильнее было бы назвать ядерными. Энергия эта выделяется в основном в виде кинетической энергии осколков деления, которую они приобретают при разлёте за счет энергии их электростатического отталкивания в точке разрыва. Таким образом, деление ядер – важнейший ядерный процесс с точки зрения практического применения.

По определению деление – такой ядерный процесс, в результате которого одно ядро (обычно довольно тяжёлое) превращается в два других ядра с близкими массами. Вот типичные примеры таких процессов:

$$^{252}_{98}\mathrm{Cf} \rightarrow {}^{138}_{54}\mathrm{Xe} + {}^{110}_{44}\mathrm{Ru} + 4n; \tag{32.1}$$

$$^{235}_{92}\mathrm{U} + n \rightarrow {}^{138}_{54}\mathrm{Xe} + {}^{95}_{38}\mathrm{Sr} + 3n. \tag{32.2}$$

Уравнение (32.1) описывает самопроизвольное (спонтанное) деление, которое является одним из видов радиоактивного распада. Нейтроны деления ($4n$) вылетают из возбуждённых осколков в течение примерно 10 фсек после разрыва ядра. Для нескольких ядер экспериментально измеренные периоды полураспада по отношению к спонтанному делению приведены в табл. 32.1. При пользовании этой таблицей следует иметь в виду, что многие изотопы испытывают несколько видов распада и спонтанное деление

не является доминирующим. Например, для урана-238 основным видом распада является альфа-распад, который идёт намного быстрее, чем спонтанное деление.

Таблица 32.1

Периоды полураспада по отношению к спонтанному делению

$^{235}_{92}\mathrm{U}$	$(9{,}8 \pm 2{,}8) \cdot 10^{18}$лет	$^{244}_{96}\mathrm{Cm}$	$(1{,}32 \pm 0{,}02) \cdot 10^{7}$лет
$^{238}_{92}\mathrm{U}$	$(8{,}2 \pm 0{,}1) \cdot 10^{15}$лет	$^{248}_{96}\mathrm{Cm}$	$(4{,}15 \pm 0{,}03) \cdot 10^{6}$лет
$^{239}_{94}\mathrm{Pu}$	$(7{,}8 \pm 1{,}8) \cdot 10^{15}$лет	$^{246}_{100}\mathrm{Fm}$	13,8 секунд
$^{244}_{94}\mathrm{Pu}$	$(6{,}6 \pm 0{,}2) \cdot 10^{10}$лет	$^{248}_{100}\mathrm{Fm}$	10 часов

Для работы ядерного реактора особенно большое значение имеют две реакции:

$$^{235}_{92}\mathrm{U} + n \rightarrow \text{деление}, \tag{32.3}$$

$$^{238}_{92}\mathrm{U} + n \rightarrow {}^{239}_{92}\mathrm{U} + \gamma. \tag{32.4}$$

Уравнение (32.3) описывает реакцию деления урана-235 нейтронами. Именно эта реакция является «рабочей» для ядерного реактора. Уравнение (32.4) описывает радиационный захват нейтронов ядрами урана-238. Эта реакция является вредной для работы стандартного современного ядерного реактора. Сечения этих реакций показаны на рис. 32.1.

Массовые и зарядовые числа осколков не фиксированы, они являются случайными величинами. При этом отношение A/Z в процессе деления с хорошей точностью остаётся таким же, как и в материнском ядре. При делении урана тепловыми нейтронами чаще всего происходит реакция, близкая к (32.2), т. е. деление является асимметричным.

Столкновение двух ядер (или нейтрона с ядром) вовсе не обязательно приводит к слиянию или делению. Один из возможных сценариев – абсолютно упругое соударение. Сталкивающиеся частицы в этом случае ведут себя точно так же, как бильярдные шары. Какие законы при этом выполняются?

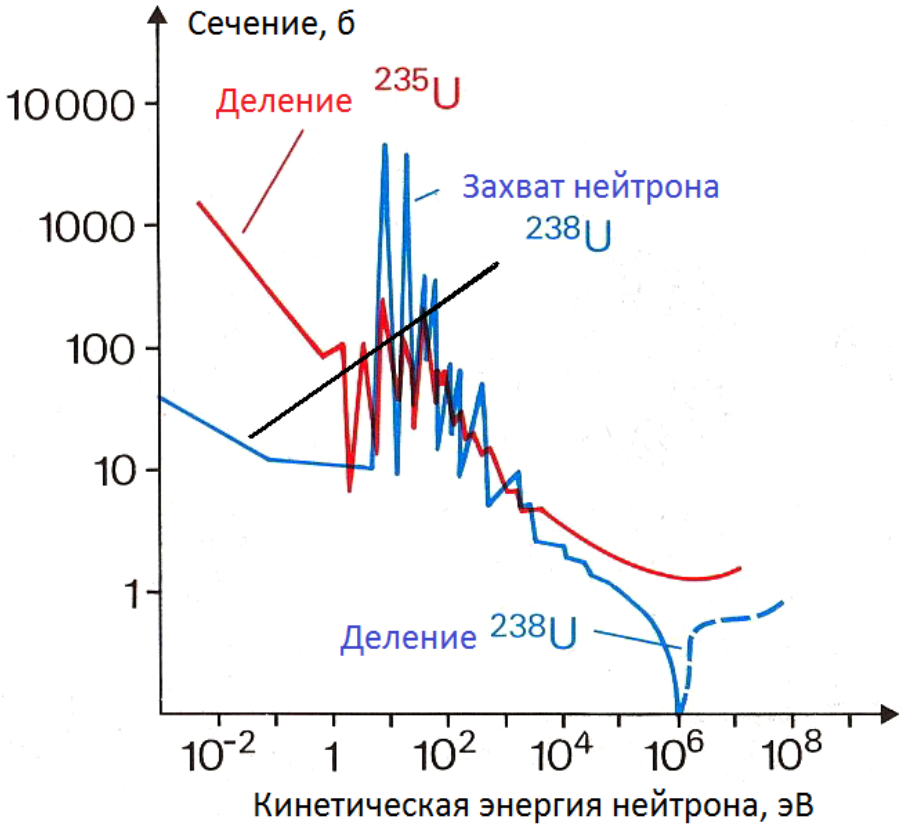

Рис. 32.1. Зависимость сечений взаимодействия урана-235 и урана-238 с нейтронами от кинетической энергии налетающего нейтрона

Абсолютно упругий удар между нейтроном и ядром работает, например, в ядерных реакторах. Дело в том, что деление ядра урана происходит наиболее эффективно, если ядро поглощает нейтрон, имеющий очень малую кинетическую энергию. А нейтроны, которые образуются при делении, имеют довольно высокую кинетическую энергию (около 1 МэВ). Итак, в реактор надо ввести такое вещество, чтобы нейтроны при столкновении с его ядрами быстро теряли свою энергию, но которое бы не поглощало нейтроны. Такое вещество называется замедлителем нейтронов, и без него реактор не будет работать. Наиболее эффективно замедлять нейтроны будет вещество с как можно более легкими ядрами (см. задания 4.4 и 4.5). Лучше всего подошел бы водород, но он взрывоопасен и интенсивно поглощает нейтроны, образуя дейтерий. Поэтому в качестве замедлителя нейтронов в ядерных реакторах используют обычную или тяжелую воду, а также графит.

Для моделирования процесса деления атомных ядер могут быть использованы те же идеи и уравнения, что и для процесса диффузии (см. раздел 20). Состояние ядра под действием тепловых флуктуаций постоянно меняется; для его описания вводят одну или несколько координат. Мы можем вообразить себе некую частицу, которая движется в соответствующей системе координат, когда состояние ядра меняется. Эта воображаемая частица подвержена диффузии, только не в привычном для нас пространстве, а в пространстве своих координат.

Характерный вид зависимости потенциальной энергии от основной деформационной координаты – расстояния между центрами масс будущих осколков деления – представлен выше на рис. 20.2. Скорость деления как функция времени имеет вид рис. 20.4. Для квазистационарной скорости деления существует несколько аналитических формул. Самая простая из них соответствует случаю сверхзатухания (высокой диссипации энергии деформации ядра):

$$R_0 = \frac{\sqrt{W_c'' \left| W_b'' \right|}}{2\pi\eta} \exp\left(-\frac{W_B}{k_B T}\right). \tag{32.5}$$

Штрихами обозначены вторые производные по координате; η – фрикционный параметр, ответственный за диссипацию. Остальные обозначения можно вспомнить и понять, обратившись к рис. 20.2.

Задания для самостоятельного выполнения

32.1. Ядро урана $^{235}_{92}$U, захватив нейтрон, делится на два осколка: $^{140}_{55}$Cs и $^{94}_{37}$Rb. Сколько нейтронов испускается в такой ядерной реакции? Каковы причины и механизм испускания нейтронов?

32.2. Предположим, что спонтанное деление – единственная мода распада фермия-248. Какова вероятность того, что наугад взятое ядро этого изотопа проживёт меньше 120 мин?

32.3. Сколько примерно абсолютно упругих соударений с ядрами углерода-12 должен испытать нейтрон, чтобы его энергия уменьшилась от 1,5 МэВ до 25 мэВ?

33. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ, СВЯЗАННЫХ С РАБОТОЙ ОПТИЧЕСКОГО ПИНЦЕТА

Работа с микрообъектами является неотъемлемой частью многих отраслей науки и техники. Бесконтактные методы манипуляции являются одними из наиболее перспективных в данной области. В последние десятилетия значительное внимание уделяется развитию методов оптического управления микрообъектами и наночастицами. Первая работа по лазерной манипуляции частицами была выполнена А. Эшкиным в 1970 г., всего через 10 лет после изобретения лазера. В 2018 г. Эшкин был удостоен Нобелевской премии в возрасте 96 лет.

Оптический пинцет (ловушка) – оптический бесконтактный инструмент, который позволяет манипулировать микроскопическими объектами с помощью лазерного излучения. Этот инструмент показан на рис. 33.1, он использует один или несколько лазерных пучков для генерации сил, необходимых для манипуляций с частицами [25]. На пути лазерного луча устанавливается линза, проходя через которую луч сильно концентрируется в узком пространстве. При прохождении луча через линзу изменяется плотность потока энергии в нём вдоль оптической оси, что приводит к возникновению «градиентной силы». Дело в том, что диэлектрическая частица поляризуется в электрическом поле электромагнитной волны, становясь электрическим диполем. Этот диполь оказывается в области неоднородного электрического поля и втягивается в область, где поле сильнее.

Все тела и процессы, которые происходят с этими телами, подвержены тепловым флуктуациям (это вторая базовая идея физики). Влияние

тепловых флуктуаций ничтожно в привычных человеку масштабах. Но для наномасштабов тепловые флуктуации играют заметную роль и должны приниматься во внимание при анализе и/или моделировании.

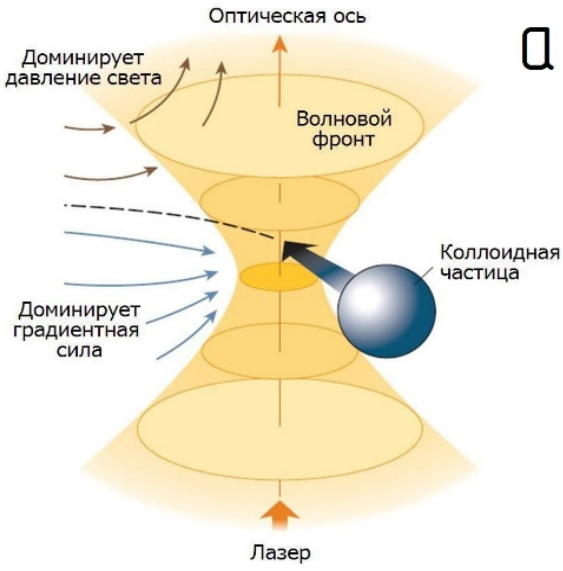

Рис. 33.1. Схема захвата частицы оптическим пинцетом

Поведение наноразмерного объекта в оптической ловушке можно рассматривать как движение броуновской частицы: область перетяжки луча формирует метастабильное состояние, молекулы или атомы газа вокруг нанообъекта обеспечивают случайные воздействия. Поэтому моделирование поведения этого объекта можно реализовывать с помощью уравнений (20.2), (20.5), (20.6).

Задания для самостоятельного выполнения

33.1. Каким образом электрически нейтральная частица удерживается электрическим полем?

33.2. Пусть радиус частицы, используемой в опыте с оптическим пинцетом, равен 55 нм. Какова должна быть энергия электронов в сканирующем электронном микроскопе, применяемых для исследования этой частицы?

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящем учебном пособии изложены базовые идеи классической и квантовой физики, а также основные законы, необходимые для понимания наноструктур. Обсуждаются наиболее яркие квантовые эффекты (туннелирование, квантование энергии и т. п.). Мы обратили особое внимание на связь со смежными дисциплинами: физикой, химией, математическим моделированием и др.

Мы постарались ознакомить читателя с основными физическими явлениями и законами, необходимыми для квантово-механического моделирования нано- и фемтоструктур и процессов. Мы также старались представить последние достижения в области нанотехнологий. Сложность заключается в том, что область эта огромна и она интенсивно развивается. В мире выходит множество соответствующих журналов (например, Nature Nanotechnology, Nanotechnology (IOP), Complexity, Carbon, Nanotechnologies in Russia). Только журналы серии Physical Review показывают тысячи ссылок на слова nano, nanoparticles, nanotechnology и т. п. Поэтому мы не смогли отразить здесь многие отрасли из этой области. В частности, из-за ограниченного объёма не удалось обсудить биполярные, полевые и одноэлектронные транзисторы. Не вошла в наш текст и информация о транзисторах с плавающим затвором, которые служат элементами флеш-памяти.

Усвоенные в процессе работы с данным учебным пособием знания дадут возможность ориентироваться в многообразии методов и подходов, которые нужны для решения конкретных исследовательских задач. Мы будем считать нашу цель достигнутой, если обучаемый поймёт физические принципы и механизмы, лежащие в основе квантово-механического моделирования наноструктур и фемтоструктур.

Более глубокие знания можно почерпнуть из литературы, приведённой ниже, а также из интернет-ресурсов, ссылки на которые представлены во многих разделах пособия.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Детлаф, А. А. Курс физики : учеб. пособие для втузов / А. А. Детлаф, Б. М. Яворский. – Москва : Академия, 2009. – 720 с. – ISBN 978-5-7695-6478-9.

2. Трофимова, Т. И. Курс физики : учеб. пособие для втузов / Т. И. Трофимова. – Москва : Академия, 2006. – 558 с. – ISBN 5-7695-2956-3.

3. Бондарев, Б. В. Курс общей физики : учеб. пособие : в 3 кн. Кн. 3. Термодинамика, статистическая физика, строение вещества / Б. В. Бондарев, Н. П. Калашников, Г. Г. Спирин. – Москва : Юрайт, 2015. – 369 с. – ISBN 978-5-9916-1755-0.

4. Основы квантовой механики : метод. указания к практ. занятиям и самостоят. работе студентов / Ом. гос. техн. ун-т ; сост.: И. И. Гончар, М. В. Чушнякова. – Омск : Изд-во ОмГТУ, 2017. – 1 CD-ROM (0,43 Мб). – Заглавие с этикетки диска.

5. Пономарев, Л. И. Под знаком кванта / Л. И. Пономарев. – Москва : Физматлит, 2012. – 461 с. – ISBN 978-5-9221-1368-7.

6. Гольдин, Л. Л. Квантовая физика. Вводный курс / Л. Л. Гольдин, Г. И. Новикова. – Москва : Институт компьютерных исследований, 2002. – 496 с.

7. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика : учеб. пособие : в 10 т. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Физматлит, 2021. – 800 с. – ISBN 978-5-9221-0530-9.

8. Калитеевский, Н. И. Волновая оптика : учеб. пособие для ун-тов / Н. И. Калитеевский. – Москва : Высш. школа, 1978. – 383 с.

9. Епифанов, Г. И. Физика твердого тела : учеб. пособие / Г. И. Епифанов. – Санкт- Петербург : Лань, 2021. – 288 с. – ISBN 978-58114-1001-9.

10. Левинштейн, М. Е. Барьеры: от кристалла до интегральной микросхемы / М. Е. Левинштейн, Г. С. Симин. – Москва : Наука, 1987. – 319 с.

11. Левинштейн, М. Е. Знакомство с полупроводниками / М. Е. Левинштейн, Г. С. Симин. – Москва : Наука, 1984. – 240 с.

12. Савельев, И. В. Курс общей физики : учеб. пособие : в 5 т. Т. 5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И. В. Савельев. – Москва : Лань, 2011. – 384 с. – ISBN 978-5-8114-1211-2.

13. Компьютерра. Легендарный журнал о современных технологиях : сайт. – URL: https://www.computerra.ru/ (дата обращения: 04.02.2022).

14. Широков, Ю. М. Ядерная физика / Ю. М. Широков, Н. П. Юдин. – Москва : Наука, 1980. – 728 с.

15. Физические части речи: физические величины / И. И. Гончар, М. В. Чушнякова, С. Н. Крохин, Н. А. Хмырова // Омский научный вестник. – 2015. – № 3 (139). – С. 130–132.

16. Гончар, И. И. Особенности преподавания физики в российских технических вузах первой четверти XXI века / И. И. Гончар, М. В. Чушнякова, Т. А. Аронова // Вестник Омского государственного педагогического университета. – 2019. – № 1 (22). – С. 97–99.

17. Quantum states of neutrons in the Earth's gravitational feld / V. V. Nesvizhevsky, H. G. Börner, A. K. Petukhov, H. Abele // Letters to Nature. – 2002. – Vol. 415. – P. 297–299.

18. Глинка, Н. Л. Общая химия : учеб. для академ. бакалавриата : в 2 т. / Н. Л. Глинка ; под ред. В. А. Попкова, А. В. Бабкова. – Москва : Юрайт, 2017. – Т. 1. – 349 с. – ISBN 978-5-9916-9353-0.

19. Глинка, Н. Л. Общая химия : учеб. для академ. бакалавриата : в 2 т. / Н. Л. Глинка ; под ред. В. А. Попкова, А. В. Бабкова. – 20-е изд., перераб. и доп. – Москва : Юрайт, 2019. – Т. 2. – 383 с. – ISBN 978-5-9916-9355-4.

20. Теория твердого тела : метод. указания к практ. занятиям / Ом. гос. техн. ун-т ; сост.: И. И. Гончар, М. В. Чушнякова. – Омск : Изд-во ОмГТУ, 2017. – 1 CD-ROM (0.34 Мб). – Загл. с этикетки диска.

21. Физическая энциклопедия : в 5 т. / гл. ред. А. М. Прохоров. – Москва : Большая Рос. энцикл., 1988–1998.

22. Демиховский, В. Я. Квантовые ямы, нити, точки. Что это такое? / В. Я. Демиховский // Соросовский образовательный журнал. – 1997. – № 5. – С. 80–86.

23. Fert, A. Nobel Lecture: Origin, development, and future of spintronics / A. Fert // Reviews of Modern Physics. – 2008. – Vol. 80. – P. 1517.

24. Grünberg, P. A. Nobel Lecture: From spin waves to giant magnetoresistance and beyond / P. A. Grünberg // Reviews of Modern Physics. – 2008. – Vol. 80. – P. 1531.

25. Direct measurement of Kramers turnover with a levitated nanoparticle / L. Rondin, J. Gieseler, F. Ricci, R. Quidant, C. Dellago // Nature Nanotechnology. – 2017. – Vol. 12. – P. 1130–1133.