

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
Томский государственный университет  
систем управления и радиоэлектроники

**Кафедра физики**

**А.В. Лячин, Ю.П. Чужков**

# **АТОМНАЯ ФИЗИКА И ФИЗИКА ТВЁРДОГО ТЕЛА**

Учебно-методическое пособие  
по аудиторным практическим занятиям  
и самостоятельной работе  
для студентов всех направлений подготовки

Томск  
2018

### **Рецензент**

**Ремпе Н. Г.**, д-р техн. наук, профессор кафедры физики  
Томск. гос. ун-та систем упр. и радиоэлектроники

### **Лячин, Александр Владимирович**

Атомная физика и физика твёрдого тела: учеб.-метод. пособие по аудиторным практ. занятиям и самостоятельной работе для студентов всех направлений подготовки / А.В. Лячин, Ю.П. Чужков. – Томск: Томск. гос. ун-т систем упр. и радиоэлектроники, 2018. – 147 с.

Содержит краткую теорию, примеры решения задач, тестовые задания, задачи для аудиторных практических занятий и самостоятельного решения, список рекомендуемой литературы, а также вопросы для самоконтроля по разделу «Атомная физика и физика твёрдого тела» дисциплины «Физика» («Физика для информатики», «Физика и естествознание» и т.п.).

Для студентов очной, очно-заочной и заочной форм образования всех направлений подготовки.

© Лячин А.В., Чужков Ю.П., 2018

© Томск. гос. ун-т систем упр.  
и радиоэлектроники, 2018

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение .....	5
<b>1 МОДЕЛЬ АТОМА. ТЕОРИЯ БОРА. ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ</b>	
1.1 Краткая теория.....	6
1.2 Примеры решения задач .....	9
1.3 Задачи для решения на практических занятиях .....	18
1.4 Задачи для самостоятельного решения .....	20
1.5 Вопросы для самоконтроля .....	22
<b>2 ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ</b>	
2.1 Волновые свойства вещества. Волны де Бройля. Соотношение неопределенностей.....	24
2.1.1 Краткая теория.....	24
2.1.2 Примеры решения задач .....	27
2.1.3 Задачи для решения на практических занятиях.....	34
2.1.4 Задачи для самостоятельного решения.....	36
2.1.5 Вопросы для самоконтроля .....	38
2.2 Уравнение Шредингера. Частицы в потенциальной яме .....	39
2.2.1 Краткая теория.....	39
2.2.2 Примеры решения задач .....	42
2.2.3 Задачи для решения на практических занятиях.....	46
2.2.4 Задачи для самостоятельного решения.....	49
2.2.5 Вопросы для самоконтроля .....	52
2.3 Потенциальный барьер. Туннельный эффект .....	52
2.3.1 Краткая теория.....	52
2.3.2 Примеры решения задач .....	55
2.3.3 Задачи для решения на практических занятиях.....	59
2.3.4 Задачи для самостоятельного решения.....	62
2.3.5 Вопросы для самоконтроля.....	66
2.4 Квантовые числа.....	66
2.4.1 Краткая теория.....	66
2.4.2 Примеры решения задач .....	74
2.4.3 Задачи для решения на практических занятиях.....	83
2.4.4 Задачи для самостоятельного решения.....	85
2.4.5 Вопросы для самоконтроля.....	86
<b>3 ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ</b>	
3.1 Краткая теория.....	88
3.2 Примеры решения задач .....	91
3.3 Задачи для решения на практических занятиях .....	95
3.4 Задачи для самостоятельного решения .....	97
3.5 Вопросы для самоконтроля .....	99

<b>4 ЭЛЕМЕНТЫ ФИЗИКИ ТВЁРДОГО ТЕЛА</b>	
4.1 Тепловые свойства твёрдых тел .....	101
4.1.1 Краткая теория .....	101
4.1.2 Примеры решения задач .....	109
4.1.3 Задачи для решения на практических занятиях .....	116
4.1.4 Задачи для самостоятельного решения .....	118
4.1.5 Вопросы для самоконтроля .....	120
4.2 Электропроводность твердых тел .....	121
4.2.1 Краткая теория .....	121
4.2.2 Примеры решения задач .....	130
4.2.3 Задачи для решения на практических занятиях .....	135
4.2.4 Задачи для самостоятельного решения .....	138
4.2.5 Вопросы для самоконтроля .....	140
<b>5 ОТВЕТЫ К ЗАДАНИЯМ ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ И САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ.....</b>	<b>142</b>
Рекомендуемая литература .....	146

## Введение

Учебно-методическое пособие содержит краткую теорию, примеры решения задач, задачи для самостоятельного решения, тестовые задания и список рекомендуемой литературы по каждой теме практических занятий, а также вопросы для самоконтроля по разделу «Атомная физика и физика твёрдого тела» дисциплины «Физика» и предназначено для студентов очной формы, обучающихся по всем направлениям подготовки.

В разделе «Атомная физика и физика твёрдого тела» дисциплины «Физика» предметом изучения являются: строение атомов, их свойства и спектральные характеристики; представление об атомах и микрочастицах с точки зрения квантовой механики; статистические представления о коллективах микрочастиц и использование этих представлений для описания механизмов электропроводности и теплопроводности твёрдых тел. Знание раздела «Атомная физика и физика твёрдого тела», необходимо не только для общего представления о строении и свойствах вещества, но и пригодится в последующих специальных дисциплинах при решении конкретных прикладных задач.

Темы практических занятий: «Модель атома. Теория бора. Характеристическое рентгеновское излучение», «Волны де-Бройля. Соотношение неопределенностей», «Уравнение Шредингера. Частицы в потенциальной яме. Туннельный эффект», «Квантовые числа», «Квантовые статистики», «Тепловые свойства твёрдых тел», «Электропроводность твёрдых тел».

Процесс изучения раздела «Атомная физика и физика твёрдого тела» дисциплины «Физика» направлен на формирование у студентов всех направлений подготовки необходимых компетенций.

# 1 МОДЕЛЬ АТОМА. ТЕОРИЯ БОРА. ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ

## 1.1 Краткая теория

### *Постулаты Бора*

1. Атом может длительное время находиться только в определенных, так называемых стационарных состояниях, соответствующих определенным квантовым условиям, характеризующимся дискретными значениями энергии  $E_1, E_2, E_3, \dots$ . В этих состояниях атом не излучает.

2. При переходе атома из стационарного состояния с большей энергией  $E_2$  в стационарное состояние с меньшей энергией  $E_1$  происходит излучение кванта света (фотона) с энергией  $\hbar\omega$ :

$$\hbar\omega = E_2 - E_1.$$

Такое же соотношение выполняется и в случае поглощения, когда падающий фотон переводит атом с низшего энергетического уровня  $E_1$  на более высокий  $E_2$  (правило частот Бора).

**Правило квантования орбитального момента импульса.** Бор предположил, что электрон в атоме водорода движется только по тем круговым орбитам, для которых его момент импульса  $L$  по величине кратен постоянной Планка:

$$L = n\hbar, \text{ или } mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.1)$$

где  $n$  – квантовое число.

**Полная энергия электрона** в кулоновском поле ядра согласно модели Резерфорда – Бора

$$E = E_k + U = \frac{mv^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r}, \quad (1.2)$$

**а радиус  $n$ -й стационарной орбиты**

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{mZe^2}. \quad (1.3)$$

Радиус первой стационарной орбиты электрона в атоме водорода ( $n = 1, Z = 1$ ) равен  $r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10}$  м. Его называют **первым боровским радиусом**.

**Энергия  $E_n$  электрона на  $n$ -й стационарной орбите** в системе СИ равна:

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi\epsilon_0\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}. \quad (1.4)$$

Эта формула описывает уровни энергии стационарных состояний электрона в водородоподобной системе. Для атома водорода схема энергетических уровней показана на рисунке 1.1. При  $n \rightarrow \infty$  уровни энергии сгущаются, а энергия стремится к предельному значению  $E_\infty = 0$ .

**Состояние** атома с наименьшей энергией ( $n = 1$ ) называют **основным**. Для атома водорода основному состоянию соответствует энергия  $E_1 = -13,6$  эВ. Эта энергия (по модулю) является энергией связи электрона в основном состоянии:  $E_{св} = |E_1|$ . Именно такую энергию надо сообщить электрону в основном состоянии ( $n = 1$ ), чтобы удалить его из атома водорода. По этой причине ее называют еще и **энергией ионизации**:  $E_{ион} = E_{св} = 13,6$  эВ.

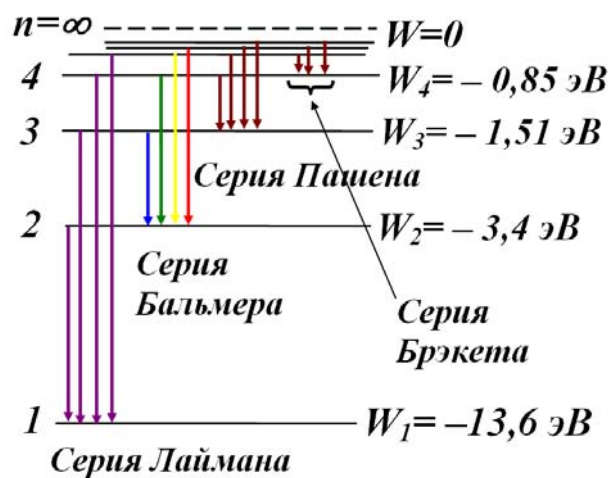


Рисунок 1.1 – Схема энергетических уровней атома водорода

**Энергия фотонов**, излучаемых или поглощаемых при переходе системы из одного стационарного состояния в другое, в СИ согласно второму постулату Бора равна:

$$\hbar\omega = E_{n_j} - E_{n_i} = \frac{me^4 Z^2}{32\pi^2\epsilon_0\hbar^2} \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right), \quad (1.5)$$

где  $n_i$  и  $n_j$  – квантовые числа состояний, между которыми совершается переход.

**Частота фотона:**

$$\omega = E_2 - E_1 = \frac{me^4 Z^2}{32\pi\epsilon_0 \hbar^3} \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right). \quad (1.6)$$

**Постоянная Ридберга:**

$$R_\omega = \frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ рад/с},$$

$$R_\nu = \frac{R_\omega}{2\pi} = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}, \quad R_\lambda = \frac{R_\omega}{2\pi c} = \frac{R_\nu}{c} = 1,097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}.$$

**Обобщенная формула Бальмера:**

$$\omega = R_\omega \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right). \quad (1.7)$$

Частоты, соответствующие серии Лаймана, возникают при переходе электрона в состояние  $n_i = 1$  со всех вышележащих энергетических уровней. Серии Бальмера соответствуют переходы в состояние с квантовым числом  $n_i = 2$  из состояний  $n_j = 3, 4, 5, \dots$ . Серия Пашена соответствует переходам электрона в состояние с квантовым числом  $n_i = 3$  из состояний  $n_j = 4, 5, 6, \dots$  (см. рисунок 1.1).

**Характеристическое рентгеновское излучение.** Английский физик Мозли установил в 1913 г. закон, связывающий частоты линий рентгеновского спектра с атомным номером  $Z$  испускающего их элемента (рисунок 1.2):

$$\omega = R_\omega (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right), \quad (1.8)$$

где  $\sigma$  – постоянная, учитывающая экранирующую роль электронов, окружающих ядро. Чем дальше электрон находится от ядра, тем эта постоянная больше.

Энергетические уровни в атоме обозначаются буквами  $K, L, M, N, \dots$ . Частоты, соответствующие  $K$ -серии, возникают при переходе электрона в состояние  $n_i = 1$  со всех вышележащих энергетических уровней.  $L$ -серии соответствуют переходы в состояние с квантовым





Дано:

$$m_0 = m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

$$m_\mu = 207 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$$

$$q_\mu = -e$$

$$\tau = 2,2 \cdot 10^{-6} \text{ с}$$

$$r_0 = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

$$\text{а) } r_n = ? \quad \frac{r_1}{r_0} = ?$$

$$\text{б) } E_{\text{св}} = ?$$

$$\text{в) } v_1 = ? \quad \frac{v_1}{v_{1e}} = ?$$

$$\text{г) } N = ?$$

*Решение.* Для решения задачи воспользуемся теорией Бора, воспроизведя цепочку рассуждений, выполненных для атома водорода, применительно к мезоатому.

а) На мюон, находящийся на орбите (рисунок 1.3), действует сила Кулона

$$F_k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2}, \text{ которая является центростремительной силой:}$$

$$F_k = m_M v_n^2 / r_n.$$

По второму закону Ньютона

$$\frac{m_M v_n^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2}. \quad (1)$$

Согласно теории Бора момент импульса мюона квантуется:

$$m_M v_n r_n = n\hbar, \quad (2)$$

где  $n = 1, 2, \dots$  – главное квантовое число.

Решив совместно уравнения (1) и (2), найдем радиусы орбит  $r_n$  и скорости мюона  $v_n$  на этих орбитах.

Выразим скорость из уравнения (2):

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_M r_n} \quad (3)$$

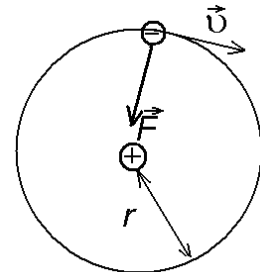


Рисунок 1.3

и подставим в уравнение (1), получаем:

$$\frac{m_M}{r_n} \frac{n^2 \hbar^2}{m_M^2 r_n^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2}.$$

Следовательно,

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_M e^2}. \quad (4)$$

Очевидно, что радиус орбиты электрона в атоме водорода

$$r_n^e = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_e e^2}.$$

Таким образом,  $r_n = \frac{r_n^e m_e}{m_M} = \frac{r_n^e}{207}$ .

В итоге радиус первой орбиты мюона определяется как  $r_1 = \frac{r_0}{207} = \frac{0,529 \cdot 10^{-10}}{207} = 2,44 \cdot 10^{-13}$  м, а отношение:  $r_1/r_0 = 1/207$ .

б) Ядро считаем неподвижным, поэтому внутренняя энергия атома равна сумме кинетической энергии мюона и потенциальной энергии взаимодействия мюона с ядром:

$$E_n = \frac{m_M v_n^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}. \quad (5)$$

Решив совместно уравнения (1) и (2) и (5), находим допустимые значения энергии мюонного атома и энергию связи  $E_{св}$ , которая равна энергии ионизации атома. Это энергия, которую надо сообщить мюону, чтобы удалить его за пределы атома. Очевидно, эта энергия равна энергии мюона в невозбужденном состоянии.

Подставив выражения (4) и (3) в формулу (5), для энергии мюона получаем:

$$E_n = \frac{m_M e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2} - \frac{m_M e^4}{4\pi\epsilon_0 \cdot 4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2} = -\frac{m_M e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Тогда энергия связи мюона в атоме ( $n = 1$ ):  $E_{св} = \frac{m_M e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$ .

Подставим значения:

$$E_{св} = 207 \left( \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \right) = 207 \cdot 13,6 \text{ эВ} = 2,82 \text{ кэВ},$$

где  $E_1 = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$  – энергия связи электрона в атоме водорода.

в) Подставив выражение (4) для радиуса в формулу (3), получаем скорость мюона на первой орбите:

$$v_n = \frac{n\hbar m_M e^2}{m_M \cdot 4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 n\hbar}. \quad (6)$$

Видно, что от массы частицы эта скорость не зависит, следовательно, скорость мюона на каждой орбите совпадает со скоростью электрона на этой орбите.

Подставим значения для  $n = 1$ , имеем:

$$v_1 = \frac{1,6^2 \cdot 10^{-38}}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}} = 2,2 \cdot 10^6 \text{ м/с.}$$

г) Чтобы найти число оборотов, которое совершит мюон до своего распада, найдем период обращения мюона:

$$T = 2\pi r_n / v_n. \quad (7)$$

Период обращения мюона после подстановки формулы (3) в выражение (7):

$$T = \frac{2\pi r_n}{n\hbar} m_M r_n = \frac{2\pi r_n^2 m_M}{n\hbar}.$$

Подставив радиус орбиты (4)  $r_n$ , получаем:

$$T = \frac{2\pi m_M}{n\hbar} \frac{16\pi^2 \varepsilon_0^2 n^4 \hbar^4}{m_M^2 e^4} = \frac{32\pi^3 \varepsilon_0^2 n^3 \hbar^3}{m_M e^4}.$$

Число оборотов мюона до его распада –  $n = \tau/T$ .

$$\text{Число оборотов } N = \frac{\tau m_M e^4}{32\pi^3 \varepsilon_0^2 n^3 \hbar^3}.$$

Подставим значения при  $n = 1$ :

$$N = \frac{2,2 \cdot 10^{-6} \cdot 207 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6^4 \cdot 10^{-76}}{32 \cdot 3,14^2 \cdot 8,85^2 \cdot 10^{-24} \cdot 1,05^3 \cdot 10^{-102}} = 3 \cdot 10^{12} \text{ оборотов.}$$

**Ответ:**  $r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_M e^2}$ ;  $r_n = \frac{r_n^e}{207}$ ;  $r_1 = 2,44 \cdot 10^{-13} \text{ м}$ ;  $E_{\text{св}} = 2,82 \text{ кэВ}$ ;

$$v_1 = 2,2 \cdot 10^6 \text{ м/с}; v_1 = v_1^e; N = 3 \cdot 10^{12} \text{ оборотов.}$$

**Задача 2.** Потенциал ионизации водородного атома  $\varphi_i = 13,6 \text{ В}$ . Вычислить: а) значение постоянной Ридберга; б) первый потенциал возбуждения  $\varphi_1$ ; в) энергию фотона, соответствующую второй линии серии Бальмера; г) длину волны первой линии  $\lambda_1$  и длину волны коротковолновой границы  $\lambda_\infty$  серий Лаймана, Бальмера, Пашена; д) сколько линий серии Бальмера попадает в видимую часть спектра?

Дано:  
 $\varphi_i = 13,6 \text{ В}$

а)  $R = ?$

б)  $\varphi_1 = ?$

в)  $E_{21} = ?$

г)  $\lambda_1 = ?$ ;

$\lambda_\infty = ?$

д)  $N = ?$

*Решение.* В задаче рассматриваются спектральные закономерности атома водорода, поэтому для ее решения воспользуемся обобщенной формулой Бальмера – Ридберга:

$$\omega = R \left( 1/n_i^2 - 1/n_j^2 \right),$$

где  $n_i = 1, 2, 3, \dots$ ,  $n_j = (n_i + 1); (n_i + 2); \dots$

а) Энергия ионизации атома  $E_i = e\varphi_i$  – это та энергия, которую необходимо сообщить валентному электрону в атоме, находящемуся в основном состоянии, чтобы удалить его за пределы атома. Для атома водорода это переход из состояния  $n_i = 1$  в бесконечность, потому из формулы Бальмера – Ридберга имеем:  $n_i = 1$ ,  $n_j = \infty$ . Тогда  $\omega_i = R$ . Домножив это выражение на постоянную Планка  $\hbar$ , получаем энергию ионизации  $\hbar\omega_i = \hbar R$ , которая с другой стороны равна  $e\varphi_i = \hbar R$ , отсюда

$$R = e\varphi_i / \hbar.$$

Подставим числовые данные:

$$R = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 13,6}{1,05 \cdot 10^{-34}} = 20,7 \cdot 10^{-15} = 2,07 \cdot 10^{-16} \text{ с}^{-1}.$$

б) Первый потенциал возбуждения соответствует энергии, которую нужно сообщить валентному электрону, находящемуся в основном состоянии, чтобы перевести его на первый возбужденный уровень (для атома водорода  $n_j = 2$ ).

Из формулы Бальмера – Ридберга получаем частоту перехода

$$\omega_1 = R \left( 1/1^2 - 1/2^2 \right) = 3R/4,$$

энергия этого перехода  $\varepsilon_1 = \hbar\omega_1$ , тогда первый потенциал возбуждения равен

$$\varphi_1 = \varepsilon_1 / e = \frac{(3/4)\hbar R}{e} = 3\varphi_i / 4.$$

Подставим числовые данные:  $\varphi_1 = 3 \cdot 13,6 / 4 = 10,2 \text{ В}$ .

в) Серия Бальмера соответствует переходам электрона из состояний  $n_j = 3, 4, 5, \dots$  в состояние  $n_i = 2$ . Энергия, соответствующая второй линии этой серии, равна

$$E_{21} = \hbar R \left( 1/2^2 - 1/4^2 \right) = 3\hbar R / 16 = 3E_i / 16.$$

Подставим числовые данные:  $E_{21} = 3 \cdot 13,6 / 16 = 2,55$  эВ.

г) Чтобы найти длину волны, запишем формулу Бальмера – Ридберга в виде

$$1/\lambda = (R/2\pi c) \left( 1/n_i^2 - 1/n_j^2 \right).$$

Так как нас интересуют первая и последняя линии каждой серии, то

для серии Лаймана  $n_i = 1, n_{j1} = 2, n_{j2} = \infty,$

для серии Бальмера  $n_i = 2, n_{j1} = 3, n_{j2} = \infty,$

для серии Пашена  $n_i = 3, n_{j1} = 4, n_{j2} = \infty.$

Для серии Лаймана:

длина волны первой линии

$$\lambda_1 = \frac{2\pi c}{R \left( 1/1^2 - 1/2^2 \right)} = \frac{8\pi c}{R \cdot 3} = 121 \cdot 10^{-9} = 121 \text{ нм};$$

границы линии  $\lambda_\infty = \frac{2\pi c}{R \left( 1/1^1 - 1/\infty^2 \right)} = \frac{2\pi c}{R} = 91 \cdot 10^{-9} = 91 \text{ нм}.$

Для серии Бальмера:

$$\lambda_1 = \frac{2\pi c}{R \left( 1/2^2 - 1/3^2 \right)} = \frac{2\pi c}{R} \frac{36}{5} = 655,2 \text{ нм},$$

$$\lambda_\infty = \frac{2\pi c}{R} \cdot 4 = 364 \text{ нм}.$$

Для серии Пашена:

$$\lambda_1 = \frac{2\pi c}{R \left( 1/3^3 - 1/4^4 \right)} = \frac{2\pi c}{R} \frac{144}{7} = 1872 \text{ нм},$$

$$\lambda_\infty = \frac{2\pi c}{R} \cdot 9 = 819 \text{ нм}.$$

д) В видимую часть спектра попадают длины волн в диапазоне от 400 нм до 760 нм. Рассчитав длины волн серии Бальмера, подсчитаем число линий, длины которых укладываются в этот диапазон.

Произведем подсчет длин волн всех линий серии Бальмера, лежащих в видимой части спектра:

$$\lambda_1 = \frac{2\pi c}{R(1/2^2 - 1/3^2)} = \frac{2\pi c}{R} \frac{36}{5} = 655,2 \text{ нм};$$

$$\lambda_2 = \frac{2\pi c}{R} \frac{1}{1/2^2 - 1/4^2} = \frac{2\pi c}{R} \frac{16}{3} = 485 \text{ нм};$$

$$\lambda_3 = \frac{2\pi c}{R} \frac{1}{1/2^2 - 1/5^2} = \frac{2\pi c}{R} \frac{100}{21} = 433 \text{ нм};$$

$$\lambda_4 = \frac{2\pi c}{R} \frac{1}{1/2^2 - 1/6^2} = \frac{2\pi c}{R} \frac{36}{8} = 409,5 \text{ нм};$$

$$\lambda_5 = \frac{2\pi c}{R} \frac{1}{1/2^2 - 1/7^2} = \frac{2\pi c}{R} \frac{196}{45} = 396 \text{ нм}.$$

Линия  $\lambda_5$  лежит уже в ультрафиолетовой части спектра. Таким образом, число линий серии Бальмера, лежащих в видимой части спектра, равно  $N = 4$ .

**Ответ:** а)  $R = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$ ; б)  $\phi_1 = 10,2 \text{ В}$ ; в)  $E_{21} = 2,55 \text{ эВ}$ ; г)  $\lambda_1 = 121 \text{ нм}$ ;  $\lambda_\infty = 91 \text{ нм}$ ;  $\lambda_1 = 655,2 \text{ нм}$ ;  $\lambda_\infty = 364 \text{ нм}$ ;  $\lambda_1 = 1872 \text{ нм}$ ;  $\lambda_\infty = 364 \text{ нм}$ ; д)  $N = 4$ .

**Задача 3.** Какую работу нужно совершить, чтобы удалить электрон со второй орбиты атома водорода за пределы притяжения его ядром?

Дано:

$$n = 2$$

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

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

$$A = ?$$

*Решение.* Чтобы удалить электрон со второй орбиты атома, необходимо совершить работу, равную потенциальной энергии на этой орбите в поле электростатического притяжения ядра. Очевидно, эта энергия равна

$$E_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}, \quad (1)$$

где  $r_n$  – радиус орбиты, который можно найти по второму закону Ньютона:

$$\frac{mv^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2}. \quad (2)$$

Для определения скорости  $v$  электрона воспользуемся правилом квантования орбитального момента импульса электрона

$$mvr_n = n\hbar. \quad (3)$$

Решив совместно эти три уравнения, находим работу по удалению электрона.

Скорость электрона на  $n$ -й орбите согласно выражению (3)  $v = \frac{n\hbar}{mr_n}$ , подставив полученную формулу в (2), получаем:

$\frac{m n^2 \hbar^2}{r_n m^2 r_n^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2}$ , отсюда  $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{me^2}$ . Подставив в (1), находим работу:

$$A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{me^4}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2} = \frac{me^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2}.$$

Подставим в формулу числовые значения:

$$A = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6^4 \cdot 10^{-76}}{9^2 \cdot 10^{18} \cdot 1,05} = 5,47 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 3,42 \text{ эВ}.$$

**Ответ:**  $A = 5,47 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 3,42 \text{ эВ}$ .

**Задача 4.** Определить изменение орбитального момента импульса и орбитального магнитного момента электрона при переходе его из возбужденного состояния в основное с испусканием фотона с длиной волны  $\lambda = 1,02 \cdot 10^{-7} \text{ м}$ .

Дано:

$$n_i = 1$$

$$\lambda = 1,02 \cdot 10^{-7} \text{ м}$$

$$\Delta L = ?$$

*Решение.* Электрон в атоме водорода перешел из состояния с номером  $n_j$  в основное состояние  $n_i = 1$ . Длина волны испущенного фотона известна, следовательно, воспользовавшись формулой Бальмера – Ридберга  $1/\lambda = [R/(2\pi c)](1/n_i^2 - 1/n_j^2)$ , найдем  $n_j$ :

$$n_j = \frac{1}{\sqrt{1/n_i^2 - 2\pi c / \lambda R}}.$$

Согласно правилу квантования орбит, момент импульса электрона на  $n$ -й орбите  $L_n = n\hbar$ , тогда изменение момента импульса  $\Delta L = L_{n2} - L_{n1}$ .

Момент импульса в возбужденном состоянии

$$L_{nj} = n_j \hbar = \frac{\hbar}{\sqrt{1/n_i^2 - 2\pi c / \lambda R}},$$

в основном состоянии  $L_{ni} = n_i \hbar = \hbar$ , и изменение момента импульса



$$\Delta L = L_{ni} - L_{nj} = \hbar - \frac{\hbar}{\sqrt{1/n_i^2 - 2\pi c / \lambda R}} = \hbar \left( 1 - \frac{\hbar}{\sqrt{1/n_i^2 - 2\pi c / \lambda R}} \right).$$

Подставим числовые данные:

$$\Delta L = 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{6,28 \cdot 3 \cdot 10^8}{1,02 \cdot 10^{-7} \cdot 2 \cdot 10^{-16}}}} \right) = -2,03 \cdot 10^{-34} \text{ кг} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}.$$

Момент импульса при переходе электрона в основное состояние уменьшился.

Электрон, движущийся по орбите, обладает магнитным моментом  $\mu = IS$ , где  $I$  – сила тока, соответствующего движению электрона,  $I = e/T$  ( $T$  – период обращения  $T = 2\pi r / v$ ),  $S = 2\pi r^2$  – площадь, охватываемая орбитой, тогда

$$\mu_n = \frac{e\pi r_n^2}{2\pi r_n} v = \frac{e}{2} r_n v = \frac{e}{2m} (mvr_n) = \frac{e}{2m} \cdot L_n.$$

Это гиромангнитное отношение, связывающее орбитальные магнитный и механический (импульса) моменты электрона в атоме водорода. Изменение магнитного момента  $\Delta\mu = -(e/2m)\Delta L_n$ .

Изменение магнитного момента электрона

$$\Delta\mu = -\frac{e\hbar}{2m_e c} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1/n_j^2 - 2\pi c / \lambda R}} \right).$$

$$\text{Подставим значения: } \Delta\mu = \frac{-1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 2 \cdot 10^{-34}}{3 \cdot 10^8 \cdot 2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} = 5,8 \cdot 10^{-32} \text{ А} \cdot \text{м}^2.$$

Магнитный момент увеличился.

$$\text{Ответ: } \Delta L = -2,03 \cdot 10^{-34} \text{ кг} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}, \Delta\mu = 5,8 \cdot 10^{-32} \text{ А} \cdot \text{м}^2.$$

**Задача 5.** Считая поправку в законе Мозли равной единице, найти, сколько элементов содержится в ряду между элементами, у которых длины волн  $K_\alpha$ -линий равны 375,3 пм и 251,2 пм (20 (Ca), 21 (Sc), 22 (Ti)).

Дано:

$$\sigma = 1$$

$$\lambda_1 = 3,753 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

$$\lambda_2 = 2,512 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$


---


$$Z = ?$$

*Решение.* Линии  $K_\alpha$ , излучаемые атомом, возникают при переходе электрона с уровня  $n_j = 2$  на уровень  $n_i = 1$ . Согласно формуле Мозли:

$$\omega = R_\omega (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right). \quad (1)$$

Определим атомные номера  $Z$  элементов, для которых известны длины волн  $K_\alpha$ -линий. Учтём, что  $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ . Тогда формулу (1) можно записать

$$\frac{2\pi c}{\lambda} = R_\omega (Z - 1)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = \frac{3}{4} R_\omega (Z - 1)^2.$$

Отсюда выразим  $Z$ : 
$$Z = 1 + \sqrt{\frac{8\pi c}{3\lambda R_\omega}}.$$

Подставим значения длин волн из дано:

$$Z_1 = 1 + \sqrt{\frac{8 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8}{3 \cdot 3,753 \cdot 10^{-10} \cdot 2,07 \cdot 10^{16}}} = 19;$$

$$Z_2 = 1 + \sqrt{\frac{8 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8}{3 \cdot 2,512 \cdot 10^{-10} \cdot 2,07 \cdot 10^{16}}} = 23.$$

В итоге можно сделать вывод, что между элементами с номерами 19 и 23 находятся 3 элемента, атомные номера которых 20 (Ca, кальций), 21 (Sc, скандий), 22 (Ti, титан).

**Ответ:** 3 элемента: 20 (Ca, кальций), 21 (Sc, скандий), 22 (Ti, титан).

### 1.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. На какое расстояние  $r_{\min}$  может приблизиться к неподвижному ядру атома золота  $\alpha$ -частица при центральном соударении, если скорость частицы на большом расстоянии от ядра  $v = 3 \cdot 10^7$  м/с?

2. Сколько спектральных линий будет испускать атомарный водород, который возбуждают на  $n$ -й энергетический уровень?

3. Найти квантовое число  $n$ , соответствующее возбужденному состоянию иона  $\text{He}^+$ , если при переходе в основное состояние этот

ион испустил последовательно два фотона с длинами волн  $\lambda_1 = 121,4$  нм,  $\lambda_2 = 30,35$  нм.

4. Определите длину волны спектра испускания ионизованного гелия, соответствующего переходу электрона с орбиты  $n_2 = 4$  на орбиту с  $n_1 = 2$ .

5. Пользуясь формулой Бальмера, рассчитайте коротковолновую и длинноволновую границы спектра атомарного водорода для серии Бальмера.

6. Учитывая, что в постоянную Ридберга  $R$  входит приведенная масса ядра и электрона, найдите разность длин волн головных линий серии Лаймана для атомов легкого и тяжелого водорода (дейтерия). На сколько электронвольт отличаются работы ионизации для этих атомов?

7. Определить скорость  $v$  электрона на второй орбите атома водорода.

8. Вычислить длину волны  $\lambda$ , которую испускает ион лития  $\text{Li}^{++}$  при переходе со второго энергетического уровня на первый.

9. Определить первый потенциал  $U_1$  возбуждения иона  $\text{Li}^{++}$ .

10. При исследовании линейчатого рентгеновского спектра некоторого элемента было найдено, что длина волны  $\lambda$  линии  $K_\alpha$  равна 76 пм. Какой это элемент?

### Тестовые задания

1. Согласно первому постулату Бора электроны могут двигаться в атоме только по определённым (стационарным) орбитам. Определите величину момента импульса электрона в атоме водорода, находящегося во втором возбуждённом состоянии. Ответ дайте в СИ.

Варианты ответов:

1)  $1,05 \cdot 10^{-34}$ ;    2)  $2,1 \cdot 10^{-34}$ ;    3)  $3,15 \cdot 10^{-34}$ ;    4)  $4,2 \cdot 10^{-34}$ .

2. Выберите верное соотношение между кинетической  $E_k$ , потенциальной  $E_\Pi$  и полной  $E$  энергиями электрона в атоме водорода.

Варианты ответов:

1)  $E_k = -0,5 E_\Pi$ ;  $E = E_k$ ;                      2)  $E_k = - E_\Pi$ ;  $E = 0$ ;  
3)  $E_\Pi = 2 E_k$ ;     $E = -E_k$ ;                      4)  $E_\Pi = -2 E_k$ ;  $E = -E_k$ ;  
5)  $E_k = 0,5 E_\Pi$ ;     $E = -E_k$ .

3. В какой области спектра излучения находится серия Брэкета?

Варианты ответов:

- 1) в инфракрасной;
- 2) в видимой;
- 3) в ультрафиолетовой;
- 4) в области рентгеновского излучения.

4. По какой из приведённых ниже формул может быть верно рассчитана длина волны, соответствующая второй линии спектра серии Пашена?

Варианты ответов:

- 1)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{1} - \frac{1}{9} \right)$ ;
- 2)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right)$ ;
- 3)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{16} \right)$ ;
- 3)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{16} \right)$ ;
- 5)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{25} \right)$ .

5. Выберите правильное соотношение между частотами спектральных линий  $\omega_{K\alpha}$ ,  $\omega_{K\beta}$ ,  $\omega_{L\alpha}$  в спектре характеристического рентгеновского излучения.

Варианты ответов:

- 1)  $\omega_{K\alpha} > \omega_{K\beta} > \omega_{L\alpha}$ ;
- 2)  $\omega_{K\alpha} < \omega_{K\beta} < \omega_{L\alpha}$ ;
- 3)  $\omega_{K\beta} > \omega_{K\alpha} > \omega_{L\alpha}$ ;
- 4)  $\omega_{K\beta} > \omega_{L\alpha} > \omega_{K\alpha}$ ;
- 5)  $\omega_{K\alpha} > \omega_{L\alpha} > \omega_{K\beta}$ .

#### 1.4 Задачи для самостоятельного решения

1. На какой орбите скорость электрона в атоме водорода равна 734 км/с?

2. В спектре атомарного водорода известны длины волн трех линий, принадлежащих одной и той же серии: 97,26; 102,58 и 121,57 нм. Найти длины волн других линий в данном спектре.

3. Какому элементу принадлежит водородоподобный спектр, длина волны которого в 4 раза короче, чем у атомарного водорода.

4. Пользуясь формулой Бальмера, рассчитайте коротковолновую и длинноволновую границы спектра атомарного водорода для серии Лаймана.

5. Определить атомный номер  $Z$  элемента, у которого длина волны линии  $K_\alpha$  равна  $0,19399$  нм.

6. Во сколько раз увеличится радиус орбиты электрона у атома водорода, находящегося в основном состоянии, при поглощении фотона с энергией  $12,09$  эВ?

7. На сколько необходимо увеличить внутреннюю энергию иона  $\text{He}^+$ , находящегося в основном состоянии, чтобы он смог испустить фотон, соответствующий головной линии серии Бальмера?

8. Какие линии содержит спектр поглощения атомарного водорода в диапазоне длин волн от  $95,5$  до  $130,0$  нм?

9. Найти период  $T$  обращения электрона на первой боровской орбите атома водорода и его угловую скорость  $\omega$ .

10. При каком наименьшем напряжении  $U_{\min}$  на рентгеновской трубке начинают появляться линии серии  $K_\alpha$  меди ( $Z = 29$ )?

### Тестовые задания

1. Согласно первому постулату Бора электроны могут двигаться в атоме только по определённым (стационарным) орбитам. Определите величину момента импульса электрона в атоме водорода, находящегося в третьем возбуждённом состоянии. Ответ дайте в СИ.

Варианты ответов:

1)  $1,05 \cdot 10^{-34}$ ;    2)  $2,1 \cdot 10^{-34}$ ;    3)  $3,15 \cdot 10^{-34}$ ;    4)  $4,2 \cdot 10^{-34}$ .

2. Если радиус первой стационарной орбиты электрона в атоме водорода равен  $r_1$ , то чему будет равен радиус  $r$  стационарной орбиты электрона, находящегося в третьем возбуждённом состоянии?

Варианты ответов:

1)  $r = r_1$ ;    2)  $r = 3r_1$ ;    3)  $r = r_1/3$ ;  
4)  $r = 4r_1$ ;    5)  $r = 9r_1$ ;    6)  $r = 16r_1$ .

3. В какой области спектра излучения находится серия Лаймана?

Варианты ответов:

1) в инфракрасной;  
2) в видимой;  
3) в ультрафиолетовой;  
4) в области рентгеновского излучения.

4. По какой из приведённых ниже формул может быть верно рассчитана длина волны, соответствующая первой линии спектра серии Бальмера?

Варианты ответов:

$$1) \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{1} - \frac{1}{9} \right); \quad 2) \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right);$$

$$3) \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{16} \right); \quad 3) \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{16} \right);$$

$$5) \frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{25} \right).$$

5. По какой из приведённых ниже формул может быть верно рассчитана частота  $\omega_{L\beta}$  спектральной линии  $L_\beta$  в спектре характеристического рентгеновского излучения.

Варианты ответов:

$$1) \omega = R_\omega (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{1} - \frac{1}{4} \right); \quad 2) \omega = R_\omega (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right);$$

$$3) \omega = R_\omega (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{16} \right); \quad 4) \omega = R_\omega (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{16} \right);$$

$$5) \omega = R_\omega (Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{9} - \frac{1}{25} \right).$$

### 1.5 Вопросы для самоконтроля

1. Сформулируйте постулаты Бора.
2. Чему кратен момент импульса электрона?
3. Выведите выражение для полной энергии электрона в атоме водорода.
4. Может ли электрон находиться на произвольном расстоянии от ядра?
5. Каким выражением определяется радиус орбиты электрона?
6. Какие значения может принимать энергия электрона в атоме водорода? От чего эта энергия зависит?
7. Чем отличается выражение для энергии электрона в атоме водорода и в водородоподобном ионе?
8. От чего зависит энергия кванта излучаемого атомом водорода?
9. Как выглядит спектр излучения водородоподобного атома?
10. Запишите обобщённую формулу Бальмера для спектра атома водорода.

11. Какие серии спектральных линий Вы знаете?
12. Какая серия спектральных линий принадлежит видимому диапазону длин волн? Запишите для этой серии формулу Бальмера.
13. Какая серия спектральных линий принадлежит инфракрасному диапазону длин волн? Запишите для этой серии формулу Бальмера.
14. Какая серия спектральных линий принадлежит ультрафиолетовому диапазону длин волн? Запишите для этой серии формулу Бальмера.
15. В чём заключается механизм характеристического рентгеновского излучения?
16. Запишите формулу Мозли для частоты кванта энергии характеристического рентгеновского излучения.
17. Чем отличается спектр излучения атома водорода от спектра характеристического рентгеновского излучения?

## 2 ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

### 2.1 Волновые свойства вещества. Волны де Бройля. Соотношение неопределенностей

#### 2.1.1 Краткая теория

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

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

Длина волны де Бройля для материальной частицы определяется формулой де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.1)$$

где  $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная Планка. Импульс частицы в формуле (2.1) для классического и релятивистского случаев находится с использованием формул:

если  $v \ll c$ :

$$\vec{p} = m_0 \vec{v}, \quad p = \sqrt{2m_0 E_k}, \quad (2.2)$$

если  $v \approx c$ :

$$\vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad p = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - m_0^2 c^4} = \frac{1}{c} \sqrt{E_k (E_k + 2m_0 c^2)}, \quad (2.3)$$

где  $c$  – скорость света в вакууме;  $E_k$  – кинетическая энергия частицы.



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

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \text{ или } E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4. \quad (2.4)$$

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

$$\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}. \quad (2.5)$$

С учётом выше изложенных формул (2.2) и (2.3) связь длины волны де Бройля с кинетической энергией

если  $v \ll c$ :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_k}}, \quad (2.6)$$

если  $v \approx c$ :

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_k (E_k + 2m_0 c^2)}}. \quad (2.7)$$

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

$$2d \sin \alpha_0 = m\lambda, \quad (2.8)$$

где  $\alpha_0$  – угол скольжения пучка микрочастиц;  $d$  – межплоскостные расстояния;  $m$  – порядок дифракционного максимума ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ). Схема дифракции электронов при отражении от поверхности кристалла показана на (рисунок 2.1,а).

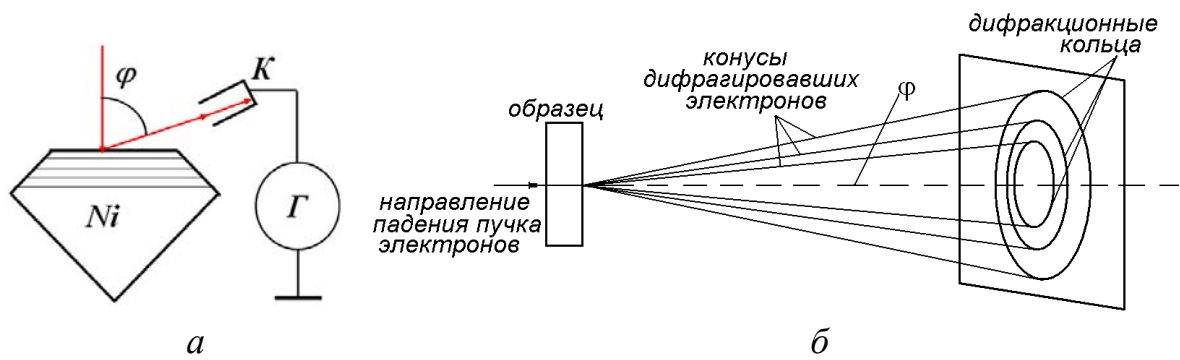


Рисунок 2.1 – Опыт Дэвисона и Джермера. Схема дифракции электронов при отражении от поверхности кристалла (а); схема дифракции электронов при прохождении электронов через тонкие кристаллические пленки (б)

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

$$d \sin \phi = \pm m\lambda, \quad (2.9)$$

где  $\phi$  – угол, который составляет направление распространения электронов, образующих дифракционный максимум  $m$ -го порядка в направлении их первоначального движения. Дифракция электронов при прохождении электронов через тонкие кристаллические пленки изображена на рисунке 2.1,б).

### Соотношение неопределенности

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

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

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.10)$$

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

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

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

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.11)$$

где  $\Delta E$  – неопределенность значения энергии нестационарного состояния замкнутой системы;  $\Delta t$  – время, в течение которого существенно меняются средние значения физических величин в этой системе.

Энергии возбужденных уровней не могут быть строго определенными, т.е. уровни обладают некоторой шириной  $\Delta E$ .

## 2.1.2 Примеры решения задач

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

Дано:

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

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

$$\eta = 1 \%$$

$$E_{ке} = ?$$

$$E_{кр} = ?$$

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

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

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

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

Формулы для определения  $\lambda$  и  $\lambda_p$  получены в предыдущей задаче. Относительная ошибка  $\eta$  определяется по формуле

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

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

$$\eta = \frac{h}{\sqrt{2m_0E_k}} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{E_k}{2m_0c^2}}} \right) \frac{\sqrt{2m_0E_k}}{h} = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{E_k}{2m_0c^2}}}. \quad (3)$$

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

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

Подставим найденные значения функции (4) в равенство (3), тогда

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

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

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

Подставим в формулу (5) численные значения:

а) для электрона:

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

б) для протона:

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

**Ответ:**  $E_{ке} = 20,4 \text{ кэВ}$ ,  $E_{кр} = 37,575 \text{ МэВ}$ .

**Задача 2.** Пучок электронов падает нормально на поверхность монокристалла никеля. В направлении, составляющем угол  $55^\circ$  с нормалью к поверхности, наблюдается максимум отражения четвертого порядка при кинетической энергии падающих электронов 180 эВ. Вычислить межплоскостное расстояние, соответствующее данному отражению (см. рисунок 2.1,а).

Дано:

$$\varphi = 55^\circ$$

$$E_k = 180 \text{ эВ} = 2,88 \cdot 10^{-17} \text{ Дж}$$

$$m = 4$$

$$m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$$

$$d = ?$$

*Решение.* Микрочастицы обладают волновыми свойствами, поэтому движение свободной частицы описывается плоской волной де Бройля, длина которой рассчитывается по формуле  $\lambda = h/p$ . Волны де Бройля дифрагируют по обычным оптическим законам, если  $\lambda \sim d$ , где  $d$  – размеры препятствия, на котором происходит дифракция. Для расчета направления, в котором для данной длины волны получается максимум при дифракции от монокристалла (пространственной дифракционной решетки) используют условие Вульфа – Брегга (2.7). В данной задаче  $d$  является межплоскостным расстоянием, которое нужно найти, а величина  $\lambda$  определяется из формулы де Бройля. В условиях этой задачи  $\frac{E_k}{2m_0c^2} \ll 1$  для электрона, поэтому при расчете  $\lambda$  можно пользоваться нерелятивистской формулой для определения длины волны де Бройля.

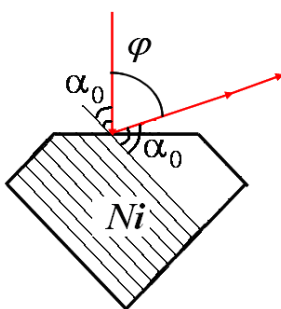
Вспользуемся формулой Вульфа – Бреггов:

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

Длину волны  $\lambda$  найдем из нерелятивистской формулы де Бройля:  $\lambda = h/p$ .

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

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



Найдем межплоскостное расстояние  $d$ , учитывая, что  $p = \sqrt{2m_0 E_k}$ :

$$d = \frac{hm}{2\sqrt{2m_0 E_k} \sin \alpha_0} \quad (2)$$

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

Подставим численные значения в формулу (2):

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

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

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

Дано:

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

$$l = 50 \text{ см} = 0,5 \text{ м}$$

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

$$v = ?$$

*Решение.* Дифракция электронов является следствием волновой природы частиц.

Для определения скорости электронов применим формулу де Бройля:  $\lambda = \frac{h}{p}$ . Для

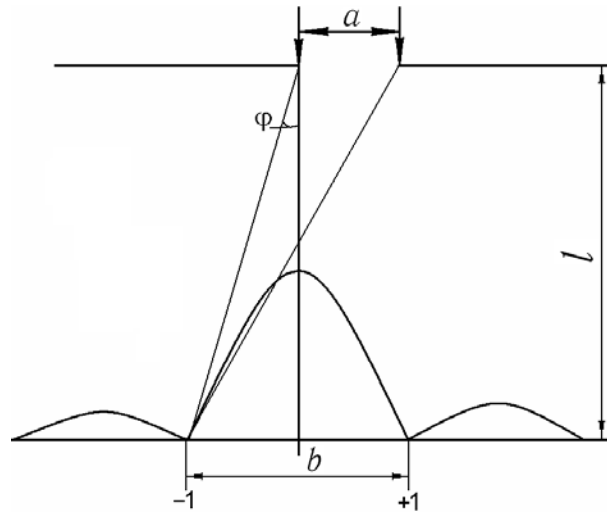
случая  $v \ll c$ , получим  $v = \frac{h}{m_0 \lambda}$ .

Дифракционная картина, возникающая при прохождении через узкую щель параллельного пучка электронов, соответствует дифракционной картине, полученной от этой же щели при освещении её параллельным пучком монохроматического света, длина волны которого равна длине волны де Бройля для электрона (рисунок). Это означает, что положение дифракционных минимумов в случае дифракции электронов от щели можно определять по формуле:  $a \sin \phi = \pm m \lambda$ , где  $a$  – ширина щели,  $\lambda$  – длина волны де Бройля,  $m$  – порядок дифракционного минимума.

Кривая, изображённая на рисунке, показывает распределение интенсивности электронного пучка в зависимости от угла  $\phi$ . Центральный максимум  $m = 0$  заключён между двумя минимумами пер-

вого порядка ( $m = \pm 1$ ). Его ширина  $b$  зависит от угла дифракции  $\varphi$ , соответствующего минимуму первого порядка:

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



Дифракционная картина

В силу малости угла  $\varphi$  из рисунка получим

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

Подставим значение (2) в (1):

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

Учитывая, что  $\lambda = \frac{h}{m_0 v}$ , получим  $\frac{ab}{2l} = \frac{h}{m_0 v}$ .

Выразим скорость:  $v = \frac{2lh}{abm_0}$ .

Подставим численные значения:

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

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

Если бы полученный результат противоречил неравенству  $v \ll c$ , это значило бы, что при расчетах электрон следовало рас-

сма́тривать как релятивистскую частицу с массой  $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ , импульс которого

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

**Ответ:**  $v = 4,55 \cdot 10^6$  м/с.

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

Дано:

$$\lambda = 0,55 \text{ мкм} = 5,5 \cdot 10^{-7} \text{ м}$$

$$\tau = 10^{-8} \text{ с}$$

$$c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$$

$$\Delta x = ? \quad \frac{\Delta \lambda}{\lambda} = ?$$

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

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

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

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

Найдем связь  $\Delta \lambda$  и  $\Delta E$ , продифференцируем для этого равенство (2):

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

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

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

Выразим величину относительной неопределенности длины волны:

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



Подставим численные значения:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx \frac{55 \cdot 10^{-8}}{4 \cdot 3,14 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-8}} \approx 1,46 \cdot 10^{-8}, \quad \Delta x = c\tau = 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-8} = 3 \text{ м.}$$

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

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

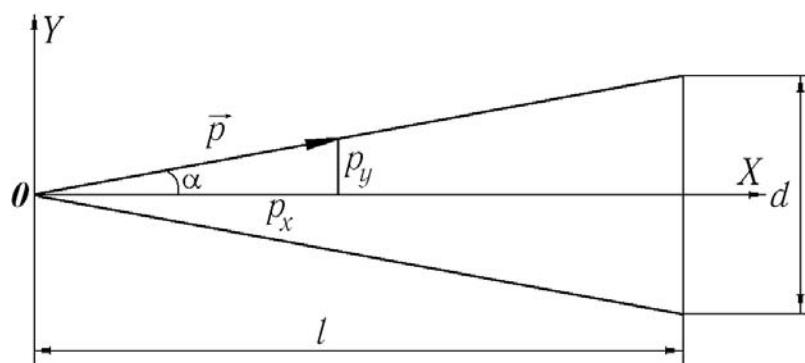
Дано:  
 $d \approx 0,5 \text{ мм} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ м}$   
 $l \approx 20 \text{ см} = 0,2 \text{ м}$   
 $U = 10 \text{ кВ} = 10^4 \text{ В}$   
 $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$   
 $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$

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

$$\Delta y = ?$$

$p = \sqrt{2mE_k}$ , если рассматривать электрон как

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



Дифракция электронов

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

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

Таким образом, неопределённость координаты электрона на экране

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

Подставим численные значения:

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

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

### 2.1.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. Найти длину волны де Бройля для: а) электрона, летящего со скоростью  $10^6$  м/с; б) атома водорода, движущегося со скоростью, равной его средней квадратичной скорости при температуре равной 300 К; в) шарика массой 11 г, движущегося со скоростью 1 см/с.

2. Найти дебройлевскую длину волны протонов, если при попадании в поперечное магнитное поле с индукцией  $B = 0,1$  Тл радиус кривизны их траектории  $r = 23$  мм.

3. При увеличении энергии электрона на  $\Delta E = 200$  эВ его дебройлевская длина волны изменилась в  $\eta = 2$  раза. Найти первоначальную длину волны электрона.

4. Найти длину волны молекул водорода, движущихся с наиболее вероятной скоростью в газе при температуре  $0$  °С.

5. Вычислить длину волны релятивистских электронов, подлетающих к антикатоде рентгеновской трубки, если длина волны коротковолновой границы сплошного рентгеновского спектра равна  $\lambda_k = 10$  пм.

6. Найти релятивистское выражение для длины волны де Бройля  $\lambda$  электрона или протона, если ускоряющее напряжение равно  $U$ . При каких значениях напряжения можно пользоваться нерелятивистским выражением, чтобы ошибка не превосходила 5%? Найти  $\lambda$  для этих частиц при  $U = 1, 10^2, 10^3, 10^5, 10^{10}, 10^{15}$  В.

7. Атом испустил фотон с длиной волны  $\lambda = 0,58$  мкм за время  $\tau \approx 10^{-8}$  с. Оценить неопределенность  $\Delta x$ , с которой можно установить координату фотона в направлении его движения, а также относительную неопределенность его длины волны.

8. Среднее время жизни атома в возбужденном состоянии составляет около  $\Delta t \sim 10^{-8}$  с. При переходе атома в нормальное состояние испускается фотон, средняя длина волны которого равна  $\lambda = 500$  нм. Оценить ширину  $\Delta\lambda$  и относительную ширину  $\Delta\lambda/\lambda$  излучаемой спектральной линии, если не происходит ее уширения за счет других процессов. (Такая ширина называется естественной шириной спектральной линии.)

9. Оценить неопределенность скорости электрона в атоме водорода, полагая размер атома порядка 0,1 нм. Сравнить полученное значение со скоростью электрона на первой боровской орбите.

10. Ускоряющее напряжение на электронно-лучевой трубке  $U \approx 10$  кВ. Расстояние от электронной пушки до экрана  $l \approx 20$  см. Оценить неопределенность координаты электрона на экране, если след электронного пучка на экране имеет диаметр  $d \approx 0,5$  мм.

### Тестовые задания

1. В каком из опытов была подтверждена гипотеза де Бройля?

Варианты ответов:

- 1) опыт Боте;
- 2) опыт Франка и Герца;
- 3) опыт Резерфорда;
- 4) опыт Дэвиссона и Джермера.

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

- а)  $\lambda = h/p$ ;   б)  $\lambda = E/c$ ;   в)  $\lambda = h/(mv)$ ;   г)  $\lambda = h/(mc)$ ,

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

Варианты ответов:

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

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

Варианты ответов:

- 1) 1,26;                      2) 1,57;                      3) 1,76;                      4) 2,03.

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

Варианты ответов:

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

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

Варианты ответов:

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

#### 2.1.4 Задачи для самостоятельного решения

1. Заряженная частица, ускоренная разностью потенциалов 200 В, имеет длину волны де Бройля, равную  $2,202 \cdot 10^{-12}$  м. Найти массу этой частицы, если ее заряд численно равен заряду электрона.

2. Найти длину волны де Бройля, соответствующую электронам с энергией 0,1 МэВ, с учетом и без учета релятивистской поправки.

3. Пучок электронов падает на естественную грань монокристалла под углом скольжения  $\alpha_0 = 30^\circ$ , отраженные электроны наблюдаются под углом падения. Постоянная кристаллической решетки  $d = 2,4 \cdot 10^{-10}$  м. Определить значение первой ускоряющей разности потенциалов, при которой наблюдается максимальное отражение электронов.

4. Электрон пролетел ускоряющую разность потенциалов  $10^5$  В. Сравнить дебройлевскую длину волны частицы с величиной неопределенности в определении ее координаты, если относительная погрешность в определении импульса составляет 1 %.

5. Оценить минимальную кинетическую энергию электрона, локализованного в области размером  $l = 0,1$  нм.

6. Сравнить дебройлевские длины волн электрона и протона, прошедших ускоряющую разность потенциалов  $U = 1000$  В.

7. При каком значении кинетической энергии электрона ошибка в определении волны де Бройля без учета релятивистской погрешности составляет 2 %?

8. Параллельный пучок электронов, ускоренных разностью потенциалов  $U = 25$  В, падает нормально на диафрагму с двумя узкими щелями, расстояние между которыми  $d = 50$  мкм. Определить расстояние между соседними максимумами дифракционной картины на экране, расположенном на расстоянии  $l = 100$  см от щелей.

9. Оценить наименьшие ошибки, с которыми можно определить скорость электрона, протона и шарика массы 1 мг, если координаты частиц и центра шарика установлены с неопределенностью 1 мкм.

10. Электрон с кинетической энергией  $K = 10$  эВ локализован в области размером  $l = 1$  мкм. Оценить относительную неопределенность скорости электрона.

### Тестовые задания

1. В чём заключается суть гипотезы де Бройля? Из приведённых ответов найдите верный.

Варианты ответов:

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

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

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

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

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

а)  $\lambda = h/p$ ; б)  $\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_k(E_k + 2m_0c^2)}}$ ; в)  $\lambda = h/(mv)$ ;

$$\text{г) } \lambda = h/(mc); \quad \text{д) } \lambda = \frac{h\sqrt{1-\frac{V^2}{C^2}}}{mV},$$

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

Варианты ответов:

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

3. Определить отношение длин волн де Бройля электрона и протона, прошедших одинаковую разность потенциалов 400 В.

Варианты ответов:

- 1) 1835;    2) 43;    3) 9,3;    4) 1.

4. Какая из предложенных ниже формулировок правильно трактует соотношение неопределенностей Гейзенберга?

Варианты ответов:

1) произведение неопределенностей двух сопряженных величин не превышает постоянную Планка;

2) произведение неопределенностей двух сопряженных величин не может быть меньше постоянной Планка;

3) произведение неопределенностей двух сопряженных величин по порядку величины не может быть меньше постоянной Планка;

4) произведение неопределенностей двух любых величин по порядку величины не может быть меньше постоянной Планка.

5. Время жизни атома в возбужденном состоянии  $\tau=10$  нс. Учитывая, что постоянная Планка  $\hbar = 6,6 \cdot 10^{-16}$  эВ·с, ширина энергетического уровня (в эВ) составляет не менее ...

Варианты ответов:

- 1)  $6,6 \cdot 10^{-8}$ ;    2)  $6,6 \cdot 10^{-10}$ ;    3)  $1,5 \cdot 10^{-8}$ ;    4)  $1,5 \cdot 10^{-10}$ .

### 2.1.5 Вопросы для самоконтроля

1. О чём гласит гипотеза де Бройля?
2. Применима ли гипотеза де Бройля к макрочастицам?
3. Запишите выражение для длины волны де Бройля для материальной частицы для классического и релятивистского случаев.
4. Какие условия необходимы для наблюдения волновых свойств микрочастиц?
5. Приведите примеры экспериментального наблюдения волновых свойств материальных частиц.

6. Запишите условие Вульфа – Бреггов при отражении электронов от поверхности монокристалла.

7. Запишите условие главных максимумов при прохождении электронов через одномерную дифракционную решетку.

8. С чем связана необходимость введения соотношения неопределённости?

9. Сформулируйте соотношение неопределённости Гейзенберга.

10. Сформулируйте выводы, следующие из соотношения неопределённости импульсов и координат микрочастицы.

11. Сформулируйте выводы, следующие из соотношения неопределённости энергии микрочастицы и времени наблюдения за ней.

## 2.2 Уравнение Шредингера. Частицы в потенциальной яме

### 2.2.1 Краткая теория

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

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

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

Вид  $\Psi$ -функции получается из решения уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (\text{временное уравнение}),$$

где  $m$  – масса частицы;  $i$  – мнимая единица;  $\nabla^2 = \Delta$  – оператор Лапласа

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

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

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

Уравнение называется уравнением Шредингера для стационарных состояний.

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

**Физический смысл имеет квадрат модуля  $\Psi$ -функции**  $|\Psi|^2 = \frac{dp}{dV}$  – плотность вероятности нахождения частицы в объеме  $V$ .

**Вероятность нахождения частицы  $p$**  в некотором объеме  $V$  находится по формуле  $p = \int_0^V |\psi|^2 dV$ .

Вероятность нахождения частицы  $p$  обозначают еще символом  $W$ .

Решение стационарного уравнения для трехмерного случая громоздко. Рассматривается квантование частицы в *одномерной потенциальной яме*. Такое состояние частицы называется **связанным состоянием**.

Потенциальная яма – это кулоновская яма, взаимодействие электронов в атоме с ядром. Потенциальная энергия электрона в атоме

$$U(r) = -k \frac{Ze \cdot e}{r}.$$

Стационарно уравнение в этом случае сильно упрощается

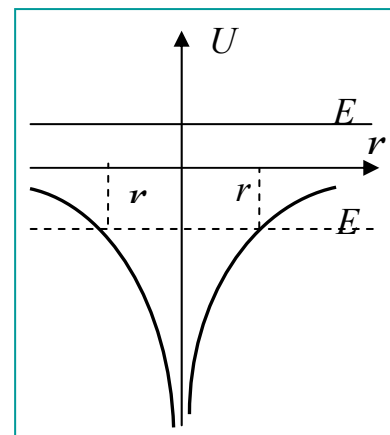
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0.$$

После замены

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0.$$

Решением этого уравнения является  $\Psi$ -функция

$$\psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{a}.$$





Это уравнение имеет решение не при любых значениях параметра  $E$ , а лишь при соответствующих значениях, называемых *собственными функциями*. Кроме того, волновая функция должна удовлетворять *стандартным условиям*:

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

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

3) удовлетворять условию нормировки.

Условие нормировки предполагает, что частица в рассматриваемом объеме есть, вероятность ее нахождения в этом объеме равна единице  $\oint_V |\psi|^2 dV = 1$ .

Условие нормировки позволяет определить амплитуду волновой функции  $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ .

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

1) выражения для расчета собственных значений энергии

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2; \quad (2.12)$$

2) вид  $\Psi$ -функции

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}; \quad (2.13)$$

3) плотность вероятности нахождения частицы в определенном месте ямы

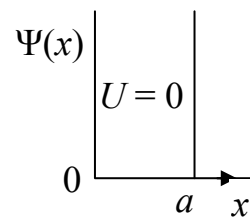
$$|\psi(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi x}{a}; \quad (2.14)$$

4) вероятность нахождения частицы в определенном месте ямы

$$p = \frac{2}{l} \int_0^x \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx. \quad (2.15)$$

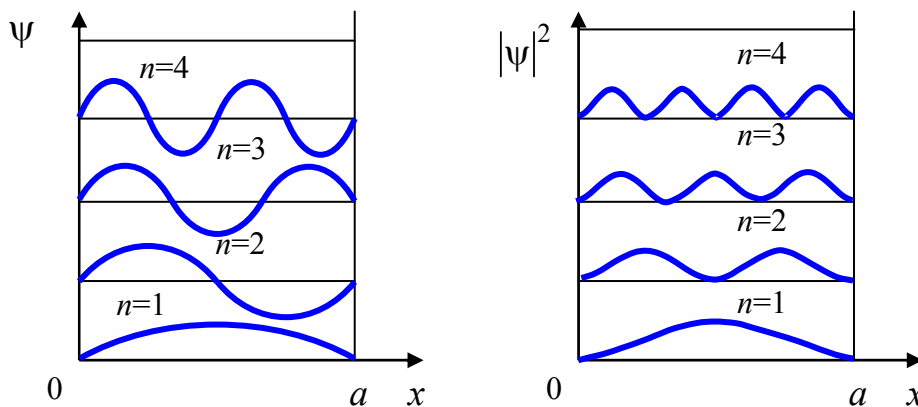
Вероятность нахождения частицы обозначают еще символом  $W$ .

Для наглядности потенциальную яму представляют в виде прямоугольной ямы шириной  $a$  с бесконечно высокими стенками. Внутри ямы потенциальная энергия  $U = 0$ , за пределами  $U = \infty$ .



Из решения уравнения следуют очень важные выводы:

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



Из рисунка видно, что в отличие от классической частицы, которая с равной вероятностью может находиться в любом месте потенциальной ямы, микрочастица *не может находиться у краёв ямы и в определённых точках на каждом энергетическом уровне*. В то же время наиболее вероятное нахождение частицы на первом уровне – середина ямы, на втором уровне – при  $x = a/4$  и  $x = 3a/4$  и т.д.

### 2.2.2 Примеры решения задач

**Задача 1.** Частица находится в возбуждённом состоянии ( $n = 2$ ) в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $a$ .

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

В каких точках интервала  $0 < x < a$  плотность вероятности координаты частицы имеет максимальное значение?

*Решение.*

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

$$|\Psi|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x. \quad (1)$$

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

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

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

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

г) По условию задачи  $n = 2$ , следовательно, минимальное значение  $x$ , при котором плотность вероятности координаты частицы имеет максимальное значение, будет при  $k = 0$ . Из (3) получаем  $x_1 = a/4$ .

д) Следующее значение  $x$ , при котором  $|\Psi|^2$  имеет максимальное значение, будет при  $k = 1$ . Из (3) получаем  $x_2 = 3a/4$ .

**Ответ:**  $x_1 = a/4$ ;  $x_2 = 3a/4$ .

**Задача 2.** Частица массой  $0,67 \cdot 10^{-26}$  кг находится в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме в третьем возбуждённом

Дано:  
 $m = 0,67 \cdot 10^{-26}$  кг,  
 $n = 4$ ,  
 $E = 3,3 \cdot 10^{-5}$  эВ =  
 $= 5,28 \cdot 10^{-24}$  Дж  
 $a = ?$

состоянии. Найти (в нм) ширину ямы, если энергия частицы в этом состоянии равна  $3,3 \cdot 10^{-5}$  эВ.

*Решение.*

а) Собственное значение энергии  $E_n$  микро-частицы массой  $m$ , находящейся в одномерной потенциальной яме шириной  $a$ , на  $n$ -м энергетическом уровне определяется выражением (3.1)

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

б) Ширину ямы  $a$  найдём из (1)

$$a = \frac{\hbar \pi n}{\sqrt{2mE}}; \quad (2)$$

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

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

**Ответ:**  $a = 4,96$  нм.

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

Дано:  
 $a = 200$  пм  $= 2 \cdot 10^{-7}$  м,  
 $n = 4$   
 $W = ?$

*Решение.*

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

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

где  $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$  – нормированная собственная волновая функция, соответствующая данному состоянию,  $n = 1, 2, \dots$

б) Возбуждённому состоянию  $n = 4$  отвечает собственная функция

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{4\pi}{a} x; \quad (2)$$

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

$$W = \frac{2}{a} \int_0^{a/4} \sin^2 \frac{4\pi}{a} x dx; \quad (3)$$

г) Используя тригонометрическое тождество  $\sin^2 \alpha = (1/2) \times (1 - \cos 2\alpha)$ , перепишем выражение (3)

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

д) Расчёт даёт  $W = \frac{1}{4} = 0,25$ .

**Ответ:**  $W = 0,25$ .

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

Дано:

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

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

$$n = 1$$

$$E = ?$$

*Решение.*

а) Согласно (2.1) собственное значение энергии  $E_n$  микрочастицы массой  $m$ , находящейся в одномерной потенциальной яме шириной  $a$  на  $n$ -м энергетическом уровне

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

б) Ширина потенциальной ямы не известна, но её можно определить из выражения для плотности вероятности местонахождения частицы (2.3)

$$|\Psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x; \quad (2)$$

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

$$a = \frac{2}{|\Psi|_{\max}^2}. \quad (3)$$

г) Подставляя (3) в (1), имеем

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

д) Численный расчёт даёт искомую величину энергии

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

**Ответ:**  $E = 0,19 \text{ эВ}$ .

**Задача 5.** Микрочастица находится в одномерной потенциальной яме шириной  $a$  с бесконечно высокими стенками на третьем

энергетическом уровне. Определить отношение плотностей вероятности обнаружения частицы в середине ямы и на расстоянии  $a/8$  от края ямы.

Дано:

$$x_1 = a/2,$$

$$x_2 = a/8,$$

$$n = 3$$

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

*Решение.*

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

$$|\Psi(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x; \quad (1)$$

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

$$|\Psi(x_1)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} \frac{a}{2} = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{2}; \quad (2)$$

в) Для координаты  $x_2$  плотность вероятности  $\Psi_n(x_2)^2$  имеет вид

$$|\Psi(x_2)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{a} \frac{a}{8} = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{n\pi}{8}; \quad (3)$$

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

$$\frac{|\Psi(x_1)|^2}{|\Psi(x_2)|^2} = \frac{\sin^2 \frac{3\pi}{2}}{\sin^2 \frac{3\pi}{8}}; \quad (4)$$

д) Расчёт даёт искомую величину

$$\frac{|\Psi(x_1)|^2}{|\Psi(x_2)|^2} = \frac{(-1)^2}{(0,92)^2} = \frac{1}{0,85} = 1,17.$$

**Ответ:**  $\frac{|\Psi(x_1)|^2}{|\Psi(x_2)|^2} = 1,17.$

### 2.2.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. Электрон находится в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $a$  с бесконечно высокими стенками. Определить, во сколько раз вероятность обнаружения электрона в средней трети ящика для первого энергетического уровня отличается от ве-

роятности обнаружения электрона на третьем энергетическом уровне.

2. Электрон находится в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме в основном стационарном состоянии. Во сколько раз уменьшится плотность вероятности обнаружения частицы в середине ямы при увеличении ширины ямы в 4 раза?

3. Электрон находится в бесконечно глубоком прямоугольном потенциальном ящике шириной  $a$ . Вычислить вероятность того, что электрон, находящийся в возбужденном состоянии, будет обнаружен в средней трети ящика.

4. Микрочастица массой  $0,52 \cdot 10^{-27}$  кг находится в одномерной потенциальной яме шириной  $a$  с вертикальными стенками, в четвертом возбужденном состоянии. Определить, сколько полувольт де Бройля этой частицы укладывается на ширине ямы.

5. В одномерной потенциальной яме бесконечной глубины движется электрон. Во сколько раз изменится минимальное значение кинетической энергии электрона при уменьшении ширины потенциальной ямы в три раза?

6. Частица массой  $2 \cdot 10^{-26}$  кг находится в одномерном потенциальном ящике шириной 3 нм с бесконечно высокими стенками. Найти энергию частицы, если она находится в третьем возбужденном состоянии. Ответ дать в эВ.

7. Электрон в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной 200 пм с бесконечно высокими стенками находится в третьем возбужденном состоянии. Определите в эВ энергию электрона в этом состоянии равна.

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

9. Частица массой  $9,1 \cdot 10^{-31}$  г находится в одномерном потенциальном ящике шириной 7 нм с бесконечно высокими стенками. Найти в эВ энергию частицы, если она находится в первом возбужденном состоянии.

10. Частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $l$  в третьем возбужденном состоянии. Во сколько раз

нужно изменить ширину ямы, чтобы при переходе частицы в пятое возбужденное состояние, энергия частицы осталась прежней?

### Тестовые задания

1. Для стационарных состояний квантовой системы характерно:

- а) фиксирование момента времени;
- б) отсутствие явной зависимости потенциальной энергии от времени;
- в) независимость полной волновой функции от времени;
- г) определенное значение энергии системы;
- д) независимость общего уравнения Шредингера, описывающего состояние системы, от времени.

Варианты ответа:

- 1) а, б, в;      2) в, г, д;      3) б, в, д;      4) д, б, г.

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

Варианты ответа:

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

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

Варианты ответа:

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

4. Волновая функция электрона в однородной бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $l$   $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ .

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

Варианты ответа:

- 1)  $x = 0$ ;    2)  $x = l/6$ ;    3)  $x = l/4$ ;    4)  $x = l/3$ ;  
5)  $x = l/2$ ;    6)  $x = 2l/3$ ;    7)  $x = 5l/6$ .

5. Частица находится в потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками в определенном энергетическом состоянии  $E_n$  с квантовым числом  $n$ , а отношение собственных значений



энергии  $E_{n+1} / E_{n-1} = 4$ . В этом случае квантовое число  $n$ , определяющее энергию  $E_n$  частицы, равно ...

Варианты ответа:

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

#### 2.2.4 Задачи для самостоятельного решения

1. Вычислить энергию, которая необходима, чтобы перевести микрочастицу массой  $2 \cdot 10^{-26}$  кг, заключённую в одномерной потенциальной яме шириной  $a = 218$  нм, с третьего энергетического уровня на пятый. Ответ выразить в эВ.

2. Микрочастица массой  $1,6 \cdot 10^{-28}$  кг находится в одномерной потенциальной яме шириной  $a$  в возбуждённом состоянии. Найти энергию частицы (в эВ) в данном состоянии, если известно, что её длина волны де Бройля, соответствующая этому состоянию, равна 76 пм.

3. Микрочастица массой  $6,68 \cdot 10^{-27}$  кг находится в одномерной потенциальной яме шириной  $a = 0,22$  нм в возбуждённом состоянии. Найти энергию частицы (в эВ) в данном состоянии, если на ширине ямы укладывается 3 полуволны де Бройля, соответствующих данному состоянию частицы.

4. Частица в потенциальном ящике шириной  $a$  находится в 3-м возбуждённом состоянии. Определить в интервале  $0 < x < 0,1 a$  минимальную координату точки, в которой плотность вероятности нахождения частицы максимальна. Ответ выразить в долях  $a$ .

5. Вычислить энергию, которая необходима, чтобы перевести микрочастицу массой  $3 \cdot 10^{-9}$  кг, заключённую в одномерной потенциальной яме шириной  $a = 331$  нм, с 6-го энергетического уровня на 7-й. Ответ выразить в эВ.

6. В одномерном потенциальном ящике шириной  $l$  находится электрон. Вычислить вероятность нахождения электрона на первом энергетическом уровне в интервале  $1/4$ , равноудаленном от стенок ящика.

7. Микрочастица массой  $1 \cdot 10^{-30}$  кг находится в одномерной потенциальной яме шириной  $a$  в возбуждённом состоянии. Найти энергию частицы (в эВ) в данном состоянии, если известно, что её длина волны де Бройля, соответствующая этому состоянию, равна 186 пм.

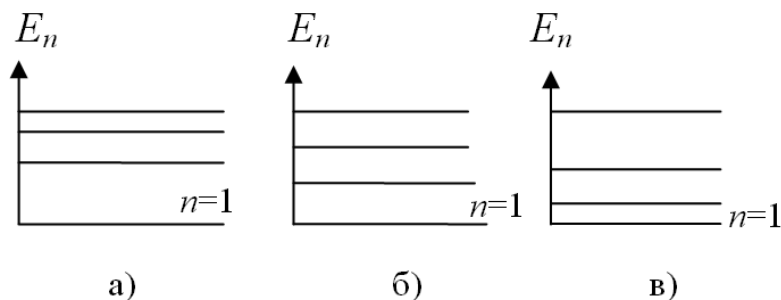
8. Электрон находится в одномерном потенциальном ящике шириной  $0,5 \text{ нм}$ . Определить в эВ наименьшую разность энергетических состояний  $\Delta E$ .

9. Частица массой  $2,7 \cdot 10^{-24} \text{ г}$  находится в одномерном потенциальном ящике шириной  $7 \text{ нм}$  с бесконечно высокими стенками. Найти в эВ энергию частицы, если она находится в пятом возбуждённом состоянии.

10. Частица помещена в одномерный потенциальный ящик шириной  $a$ . Вычислить отношение вероятностей нахождения частицы в основном состоянии и в шестом возбуждённом состоянии в центральной трети ящика.

### Тестовые задания

1. На рисунках представлен порядок размещения энергетических уровней, занимаемых электронами для трех случаев: гармонический осциллятор, потенциальная яма и атом. Из предложенных вариантов выберите правильный ответ.



Варианты ответа:

- 1) а) гармонический осциллятор; б) электрон в атоме;
- 2) а) гармонический осциллятор; в) электрон в потенциальной яме;
- 3) а) электрон в потенциальной яме; б) электрон в атоме;
- 4) а) электрон в потенциальной яме; в) электрон в атоме;
- 5) б) гармонический осциллятор; в) электрон в потенциальной яме;
- 6) б) электрон в потенциальной яме; в) гармонический осциллятор.

2. Частица может находиться в одномерной потенциальной яме шириной  $l_1$  на энергетическом уровне  $n_1 = 4$ . Если она находится в такой же потенциальной яме шириной  $l_2$  на энергетическом уровне

$n_2 = 1$ , то при равенстве энергий  $E_1 = E_2$  это будет возможным только при отношении размеров ям  $\frac{l_1}{l_2}$ , равном ....

Варианты ответа:

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

3. Из предложенных утверждений найдите **верное**. Полная энергия  $E_n$  квантовой частицы массы  $m$ , находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме, шириной  $l$  ....

Варианты ответа:

- 1) линейно растет с увеличением массы;  
 2) увеличивается обратно пропорционально  $l^2$ ;  
 3) уменьшается обратно пропорционально  $l^2$ ;  
 4) линейно растет с увеличением ширины ямы;  
 5) увеличивается обратно пропорционально  $m^2$ .

4. Волновая функция электрона в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $l$  имеет вид  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{x}} \sin \frac{n\pi x}{l}$ , где  $n$  – номер энергетического уровня. Выберите из перечисленного ряда значения  $x$ , при которых для  $n = 4$  вероятность нахождения электронов **минимальна** (кроме краев ямы).

Варианты ответа:

- 1)  $x = l/8$ ;  $x = l/4$ ;  $x = 3l/8$ ;  $x = l/2$ ;  
 2)  $x = l/8$ ;  $x = 3(l/8)$ ;  $x = 5(l/8)$ ;  $x = 7(l/8)$ ;  
 3)  $x = l/4$ ;  $x = l/2$ ;  $x = 3l/4$ ;  
 4)  $x = l/3$ ;  $x = 2l/3$ .

5. Выберите волновое уравнение, соответствующее свободно движущейся в фиксированном направлении частице (одномерный случай).

Варианты ответа:

- |  |   |
|--|---|
| 1) $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + E \psi = 0$ ;  | 2) $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ ;  |
| 3) $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ ;                          | 4) $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E \psi = 0$ ;       |
| 5) $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ ; | 6) $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - U) \psi = 0$ . |

## 2.2.5 Вопросы для самоконтроля

1. Объясните, почему волновое уравнение Шредингера называется волновым уравнением?
2. Собственные значения волновых функций являются решениями уравнения Шредингера только при условии выполнения ими стандартных условий. Назовите их.
3. Физический смысл условия нормировки.
4. Физического смысла волновая  $\Psi$ -функция не имеет, что она показывает? 5. Назовите размерность волновой функции при решении задачи о нахождении частицы в одномерной потенциальной яме.
6. Какой смысл в уравнении Шредингера имеет функция  $U = U(x, y, z)$  при рассмотрении временного и стационарного уравнений?
7. Что подразумевается под названием стационарные состояния (помимо не зависимости явно от времени)?
8. Физический смысл  $|\Psi|^2$ . Можно ли сказать, что это вероятность нахождения частицы в каком то месте пространства?
9. Какова наименьшая энергия частицы в потенциальной яме?
10. Может ли частица находиться на дне потенциальной ямы?
11. Во сколько раз нужно изменить ширину ямы, чтобы при переходе частицы из третьего возбужденного состояния в пятое, энергия частицы осталась прежней?
12. Сколько волн де Бройля располагается в потенциальной яме, если частица находится в пятом возбужденном состоянии? Как показать?
13. Можно ли утверждать, что при увеличении ширины потенциальной ямы в 2 раза, число полуволн де Бройля на энергетическом уровне этой частицы также увеличится в 2 раза?

## 2.3 Потенциальный барьер. Туннельный эффект

### 2.3.1 Краткая теория

В области пространства, где нет потенциальных ям, связанные стационарные состояния невозможны. В этом случае состояния частиц являются *нелокализованными*, а их энергия – *не дискретна* и может быть *любой*. Нелокализованное стационарное состояние харак-

терно для моноэнергетических пучков частиц, например, для электронного пучка, вылетающего из электронной пушки.

### Односторонний потенциальный барьер

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

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

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

$$\lambda_1 = \frac{h}{p_1} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}. \quad (2.16)$$

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

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

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

$$n = \frac{v_1}{v_2} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}; \quad (2.17)$$

2) пучок частиц в области потенциального барьера частично отражается от барьера. Для классических частиц с энергией  $E > U_0$  этого не может быть, каждая частица просто несколько затормозится в поле барьера, а за барьером будет двигаться в прежнем направлении с меньшей скоростью. Коэффициент отражения пучка  $R$  и коэффициент прохождения  $D$  зависят от формы барьера. На рисунке 2.2 изо-

бражён односторонний потенциальный барьер простейшей формы – прямоугольный ступенчатый барьер.

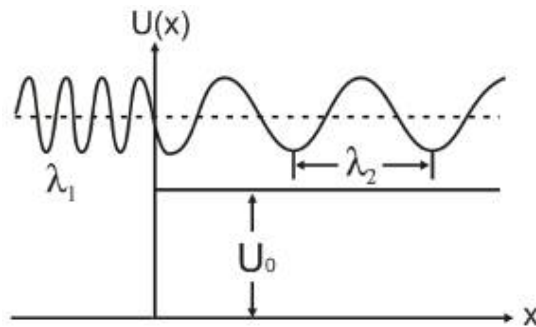


Рисунок 2.2 – Прямоугольный односторонний потенциальный барьер

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

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad (2.18)$$

$$D = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad (2.19)$$

где

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad (2.20)$$

$$k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}. \quad (2.21)$$

### Двусторонний потенциальный барьер

Простейшим видом двустороннего потенциального барьера является прямоугольный барьер (рисунок 2.3).

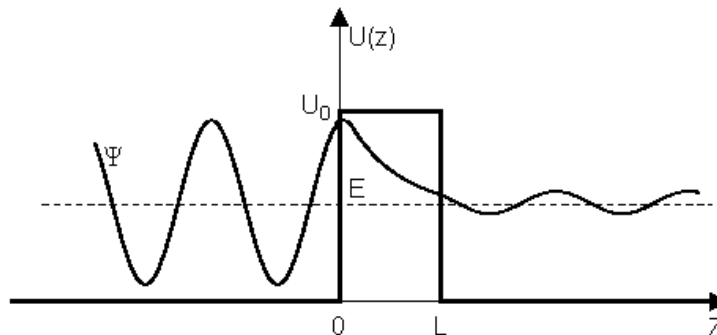


Рисунок 2.3 – Прямоугольный двусторонний потенциальный барьер

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

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

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

**Туннельный эффект является специфическим квантовым эффектом.**

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

$$D = e^{-\frac{2l\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}}. \quad (2.22)$$

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

### 2.3.2 Примеры решения задач

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

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

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

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

Формула (1) может быть приведена к виду

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

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

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

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

**Ответ:**  $R = 0,0625$ .

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

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

Дано:

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

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

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

$$D = ?$$

*Решение.*

а) Коэффициент прозрачности барьера можно определить по формуле (2.22)

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

б) Подстановка числовых данных даёт

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

**Ответ:**  $D = 0,1$ .

**Задача 3.** Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину 0,1 нм. Определить в электрон-вольтах разность энергий ( $U_0 - E$ ),



при которой вероятность прохождения электрона сквозь барьер составит 0,5.

Дано: $l = 0,1 \text{ нм} = 10^{-10} \text{ м},$ $D = 0,5,$ $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$ <hr style="border: 0; border-top: 1px solid black;"/> $(U_0 - E) = ?$	Решение. а) Коэффициент прозрачности барьера определим по формуле (2.22)
---	---

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

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

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

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

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

г) После подстановки числовых данных имеем:

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

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

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

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

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

Дано: $l = 0,1 \text{ нм} = 10^{-10} \text{ м},$ $(U_0 - E) = 5 \text{ эВ} = 8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж},$ $(U_0 - E)_2 / (U_0 - E)_1 = 4$ <hr style="border: 0; border-top: 1px solid black;"/> $D_2 / D_1 = ?$	Решение. а) Воспользуемся выражением для коэффициента прозрачности барьера (2.22) и найдём отношение $D_2 / D_1$
--	---

$$\frac{D_2}{D_1} = \exp \left[ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m} \left( \sqrt{(U_0 - E)_2} - \sqrt{(U_0 - E)_1} \right) \right];$$

б) Преобразуем выражение

$$\frac{D_2}{D_1} = \exp \left[ -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)_1} \left( \sqrt{\frac{(U_0 - E)_2}{(U_0 - E)_1}} - 1 \right) \right];$$

в) Используя условие задачи  $\frac{(U_0 - E)_2}{(U_0 - E)_1} = 4$ , получим оконча-

тельное выражение для определения отношения  $D_2 / D_1$

$$\frac{D_2}{D_1} = \exp \left( -\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)_1} \right);$$

г) Подставим числовые данные

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

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

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

Дано:

$$m = 10^{-19} \text{ кг},$$

$$v = 20 \text{ м/с},$$

$$U_0 = 100 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-17} \text{ Дж}$$

$$R = ?$$

*Решение.*

а) Коэффициент отражения волн де Бройля на границе потенциального барьера может быть рассчитан по формуле (2.22)

$$R = \left[ \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right]^2;$$

б) Подставив значения коэффициентов  $k_1$  и  $k_2$  (2.19), (2.20)

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE};$$

$$k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)},$$

можно представить в виде  $R = \left[ \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right]^2$ ;

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

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

г) Найдем значение кинетической энергии в электрон-вольтах:

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

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

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

**Ответ:**  $R = 0,146$ .

### 2.3.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. Электрон с длиной волны де Бройля, равной 100 пм, двигаясь в положительном направлении оси  $x$ , встречает на своём пути бесконечно широкий прямоугольный барьер высотой 100 эВ. Определить длину волны де Бройля после прохождения барьера.

2. Электрон с энергией 9 эВ движется в положительном направлении оси  $x$ . При какой ширине потенциального барьера в нанометрах коэффициент прозрачности равен 0,1? Высота потенциального барьера равна 10 эВ.

3. Вычислить коэффициент прохождения электрона с энергией 100 эВ через потенциальный барьер высотой 99,75 эВ.

4. Частица с энергией 10 эВ движется в положительном направлении оси  $x$ , встречая на своём пути бесконечно широкий прямоугольный потенциальный барьер высотой 5 эВ. Определить коэффициент преломления волн де Бройля на границе потенциального барьера.

5. Кинетическая энергия электрона в два раза превышает высоту потенциального барьера. Найти коэффициент отражения на границе барьера.

6. Определить показатель преломления волн де Бройля при прохождении частицей потенциального барьера с коэффициентом отражения  $R = 0,5$ .

7. При каком отношении высоты  $U$  потенциального барьера и энергии электрона, падающего на барьер, коэффициент отражения  $R = 0,5$ ?

8. Электрон с энергией  $E = 15,9$  эВ движется в положительном направлении оси  $x$ . Высота потенциального барьера  $U = 16$  эВ. При какой ширине барьера вероятность прохождения электрона через него будет равна  $0,2$ ?

9. Моноэнергетический поток электронов с энергией  $E = 100$  эВ падает на низкий прямоугольный потенциальный барьер бесконечной ширины. Определить в эВ высоту потенциального барьера  $U$ , если известно, что  $4\%$  падающих на барьер электронов отражается.

10. Коэффициент прохождения электронов через низкий потенциальный барьер равен коэффициенту отражения. Во сколько раз кинетическая энергия электронов больше высоты потенциального барьера?

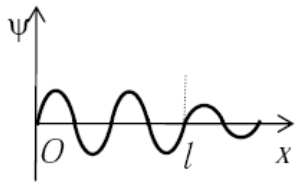
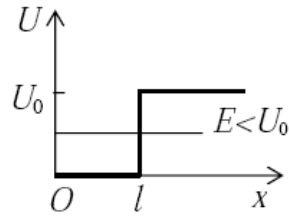
### Тестовые задания

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

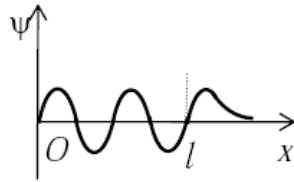
Варианты ответа:

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

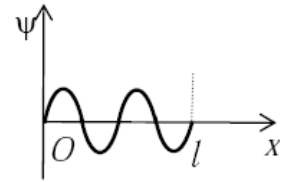
2. Частица с полной энергией  $E < U_0$  движется в одномерном потенциальном поле  $U(x)$ , изображенном на рисунке. Какой из приведенных ниже графиков правильно описывает характер изменения волновой функции  $\Psi(x)$ ?



а)



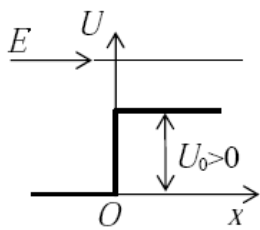
б)



в)

Варианты ответа:

- 1) а;    2) б;    3) в;    4) правильного графика нет.



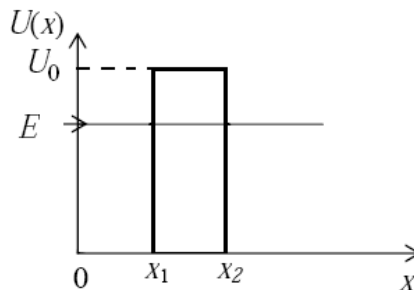
3. Частица с полной энергией  $E > U_0$  налетает на одномерный потенциальный барьер  $U(x)$ , изображенный на рисунке.

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

Варианты ответа:

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

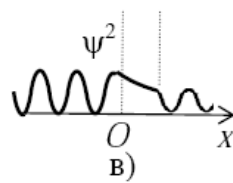
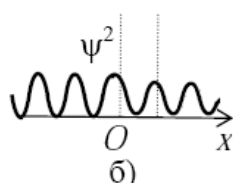
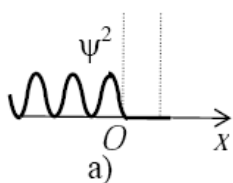
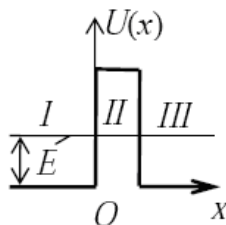
4. Коэффициент прохождения  $D$  потенциального барьера, изображённого на рисунке, равен ...



Варианты ответа:

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

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



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

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

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

Варианты ответа:

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

### 2.3.4 Задачи для самостоятельного решения

1. Протон с дебройлевской длиной волны  $2,86$  пм, двигаясь в положительном направлении оси  $x$ , встречает на своем пути бесконечно протяженный потенциальный порог высотой  $U_0$ . Определить коэффициент отражения волн де Бройля на границе потенциального барьера.

2. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину  $l = 0,15$  нм. Определите, при какой разности энергий  $U_0 - E$  вероятность  $W$  прохождения электрона сквозь барьер равна  $0,5$ . Вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер по физическому смыслу совпадает с коэффициентом прозрачности  $D$ , т.е  $W = D$ .

3. Прямоугольный потенциальный барьер имеет ширину 0,1 нм. Определить в электрон-вольтах разность энергий ( $U_0 - E$ ), при которой вероятность прохождения электрона сквозь барьер составляет 0,99.

4. Электрон, обладая кинетической энергией  $E = 100$  эВ, движется в положительном направлении оси  $x$  и встречает на своем пути бесконечно протяженный потенциальный барьер высотой  $U_0 = 75$  эВ. Во сколько раз при этом изменится дебройлевская длина волны  $\lambda_1/\lambda_2$ ?

5. Электрон, обладая кинетической энергией  $E = 25$  эВ, движется в положительном направлении оси  $x$  и встречает на своем пути бесконечно протяженный потенциальный барьер высотой  $U_0 = 9$  эВ. Во сколько раз при этом изменится дебройлевская длина волны  $\lambda_2/\lambda_1$ ?

6. Электрон, обладая кинетической энергией  $E = 100$  эВ, движется в положительном направлении оси  $x$  и встречает на своем пути бесконечно протяженный потенциальный барьер высотой  $U_0 = 36$  эВ. Определить коэффициент отражения частицы от этого барьера.

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

8. Две частицы электрон и протон, обе с энергией 10 эВ, движутся в положительном направлении оси  $x$ , встречая на своем пути прямоугольный потенциальный барьер высотой  $U_0 = 15$  эВ и шириной  $d = 1$  пм. Определить отношение вероятностей прохождения частицами этого барьера.

9. Электрон с дебройлевской длиной волны  $\lambda_1 = 0,2$  нм, двигаясь в положительном направлении оси  $x$ , встречает на своем пути бесконечно протяженный потенциальный барьер высотой  $U_0 = 100$  эВ. Определить в пикометрах длину волны де Бройля  $\lambda_2$  после прохождения потенциального барьера.

10. Электрон, обладая кинетической энергией  $E = 90$  эВ, движется в положительном направлении оси  $x$  и встречает на своем пути бесконечно протяженный потенциальный барьер высотой  $U_0 = 60$  эВ. Во сколько раз при этом изменится дебройлевская длина волны  $\lambda_2/\lambda_1$ ?

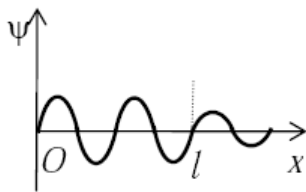
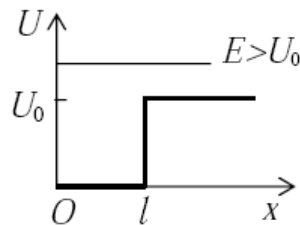
## Тестовые задания

1. Что произойдёт с длиной волны де Бройля микрочастицы с энергией  $E$ , когда она налетит на потенциальный барьер высотой  $U_0 = 3E/4$ ?

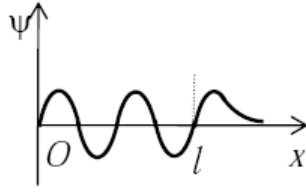
Варианты ответа:

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

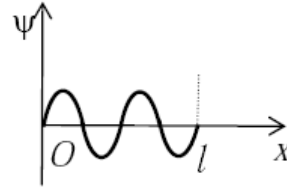
2. Частица с полной энергией  $E > U_0$  движется в одномерном потенциальном поле  $U(x)$ , изображенном на рисунке. Какой из приведенных ниже графиков правильно описывает характер изменения волновой функции  $\Psi(x)$ ?



а)



б)



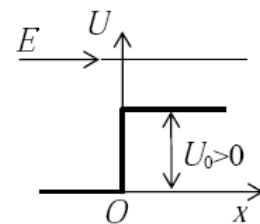
в)

Варианты ответа:

- 1) а;    2) б;    3) в;    4) правильного графика нет.

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

Для рассматриваемого случая коэффициент отражения  $R$  будет определяться выражением ...



Варианты ответа:

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





### 2.3.5 Вопросы для самоконтроля

1. Какими свойствами микрочастиц обусловлен туннельный эффект?
2. В чем отличие поведения классической и квантовой частиц с энергией  $E < U_0$  при их движении к прямоугольному потенциальному барьеру конечной ширины?
3. Как изменится коэффициент прозрачности потенциального барьера с ростом его высоты?
4. Как изменится коэффициент прозрачности потенциального барьера с увеличением массы частицы?
5. Как изменится коэффициент прозрачности потенциального барьера с увеличением полной энергии частицы?
6. Как изменится коэффициент прозрачности потенциального барьера с увеличением его ширины в два раза?
7. Запишите формулу, позволяющую рассчитать вероятность прохождения микрочастицы сквозь потенциальный барьер.
8. Что такое локализованное и не локализованное состояние?

## 2.4 Квантовые числа

### 2.4.1 Краткая теория

Потенциальная энергия электрона в водородоподобном атоме равна  $U = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ . Поле обладает центральной симметрией. Волновая функция атома водорода определяется в сферической системе координат, причем удобно представить ее в виде  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , где  $R(r)$  – радиальная часть волновой функции, а  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  – азимутальная (угловая) ее часть. Угловая часть волновой функции  $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Phi_{l|m|}(\theta)e^{im\varphi}$  зависит от орбитального квантового числа  $l$ , которое принимает дискретные значения:  $l = 0, 1, \dots, n - 1$ , а также от магнитного квантового числа  $m$ , равного  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . Квантовые числа  $l$  и  $m$  характеризуют квадрат момента импульса  $L^2$  электрона и его проекцию  $L_Z$  на ось  $Z$ . Условия квантования для  $L^2$  и  $L_Z$  запишутся:

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

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

Электрон обладает электрическим зарядом, его можно характеризовать модулем орбитального магнитного момента  $\mu$  и его проекцией  $\mu_z$  на ось  $Z$ , которые принимают дискретные значения:  $\mu = -\mu_B \sqrt{l(l+1)}$ ,  $\mu_z = -m\mu_B$ ,  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,27 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл – универсальная постоянная, называемая магнетоном Бора. Знак « $-$ » указывает, что механический  $\vec{L}$  и магнитный  $\vec{\mu}$  моменты имеют противоположные направления.

Собственный момент импульса (спин)  $L_s$  электрона и его проекция на ось  $Z$   $L_{sZ}$  принимают значения:  $L_s = \sqrt{s(s+1)}\hbar$ , где  $s = 1/2$  – спиновое квантовое число для электрона,  $L_{sZ} = \pm m_s \hbar$ , где  $m_s = \pm 1/2$ . Собственный магнитный момент  $\mu_s$  электрона и его проекция  $\mu_{sZ}$  квантуются по законам:  $\mu_s = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)}$ ,  $\mu_{sZ} = \pm \mu_B$ .

Величина полного момента импульса  $L_j$  определяется внутренним квантовым числом  $j$ , величина которого принимает дискретные значения:  $L_j = \hbar \sqrt{j(j+1)}$ , причем  $j$  для электрона в атоме водорода имеет два значения:  $j = l + s$ ,  $|l - s|$ . При  $l = 0$  квантовое число  $j$  имеет только одно значение  $j = s = 1/2$ . Проекция полного момента на направление поля принимает значения  $L_j = m_j \hbar$ , где  $m_j = 0, \pm 1, \dots, \pm j$ . Правило отбора по квантовому числу  $j$  имеет вид  $\Delta j = \pm 1, 0$ . Состояния с различным  $j$  обладают различной энергией в связи с наличием спин – орбитального взаимодействия.

В атомной физике принимаются условные обозначения состояний атома с различными моментами импульса. Эти состояния обозначаются в зависимости от величины орбитального квантового числа атома  $L = 0, 1, 2, 3$ , символами  $S, P, D, F$  и т. д. Причем справа внизу у символа указывается значение квантового числа  $J$  атома, слева сверху – мультиплетность состояния, равная  $2S + 1$ . В водородоподобных атомах испускание (поглощение) света связано с изменением движения одного электрона и именно его состояние определяет состояние атома в целом. Например, при  $L = 1, S = 1/2, J = 1/2$  состояние атома водорода запишется в виде  $^2P_{1/2}$ .

Главное квантовое число  $n$  определяет энергию электрона в водородоподобном атоме:  $E_n = -Z^2 e^4 m_e / 8 \epsilon_0^2 h^2 n^2$ , где  $Ze$  – заряд атома,  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг – масса электрона,  $\epsilon_0 = 8,86 \cdot 10^{-12}$  Ф/м – электрическая постоянная. Формула записана в СИ. Энергия определяется в Дж. Для электрона в атоме водорода  $Z = 1$ , тогда в электрон-вольтах его энергия определится по формуле:  $E_n = -13,6/n^2$  эВ.

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

Схема энергетических уровней для электрона в атоме водорода приводится на рисунке 2.4. На схеме отражено вырождение уровней. Поглощение и испускание света происходит квантами энергии  $\hbar\omega$ . При переходе электрона с одного уровня на другой испускается квант энергии:  $\hbar\omega = E_{n_j} - E_{n_i}$ , где  $n_j, n_i$  – квантовые числа этих уровней. Для орбитального квантового числа  $l$  существует правило отбора  $\Delta l = \pm 1$ , т.е. возможны лишь такие переходы, при которых  $l$  изменяется на  $\pm 1$ .

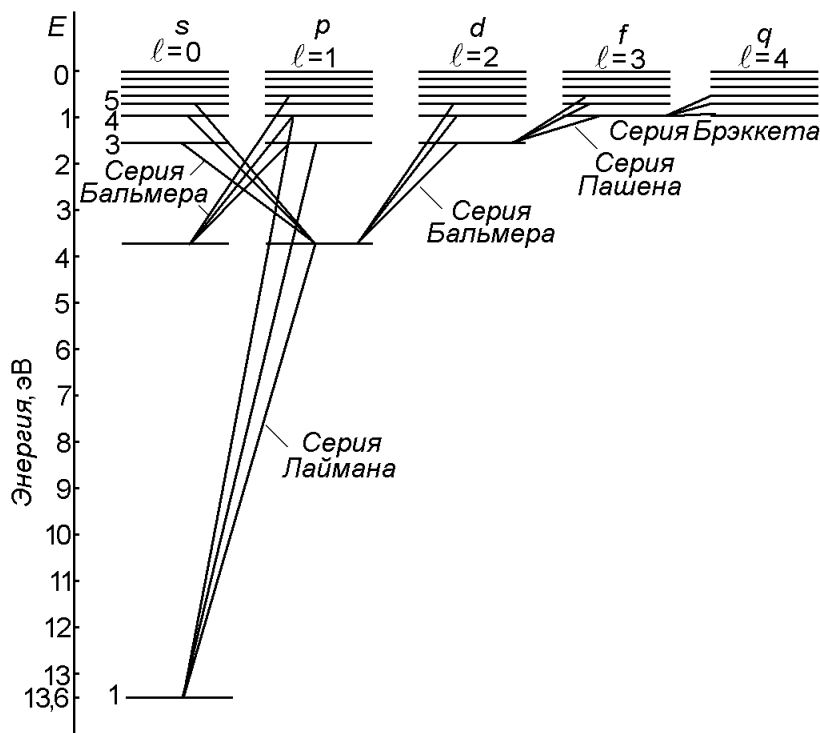


Рисунок 2.4 – Схема энергетических уровней для электрона в атоме водорода

На схеме (см. рисунок 2.4) изображены переходы, соответствующие основным сериям в спектре атома водорода:

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

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

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

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

Функции  $R_n(r)$  и  $\Phi_{\ell, (m)}(\theta)$  для  $s, p, d$  состояний с точностью до нормирующего множителя приведены в таблицах 2.4.1 и 2.4.2, здесь  $r_1$  – радиус первой боровской орбиты

Таблица 2.1

Состояние	$l$	$ m $	$\Phi_{\ell,  m }(\theta)$
$s$	0	0	1
$p$	1	0	$\cos \theta$
	1	1	$\sin \theta$
$d$	2	0	$3 \cos^2 \theta - 1$
	2	1	$\sin \theta \cos \theta$
	2	2	$\sin^2 \theta$

Таблица 2.2

Состояние	$n$	$l$	$R(r)$
$1s$	1	0	$e^{-r/r_1}$
$2s$	2	0	$(2 - r/r_1)e^{-r/2r_1}$
$2p$	2	1	$(r/r_1)e^{-r/2r_1}$
$3s$	3	0	$(21 - 81r/r_1 + 2(r/r_1)^2)e^{-r/3r_1}$
$3p$	3	1	$r/r_1(6 - r/r_1)e^{-r/3r_1}$
$3d$	3	2	$(r/r_1)^2 e^{-r/3r_1}$

### Многоэлектронные атомы

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

Спектральные термы щелочных атомов выражаются формулой:

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

а энергия электрона определится формулой:

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

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

В ионах щелочных металлов реализуются не все возможные электронные переходы, а лишь разрешенные, которые удовлетворя-

ют правилу отбора  $\Delta l = \pm 1$ , где  $\Delta l$  – разность значений орбитальных квантовых чисел, соответствующих двум состояниям валентного электрона.

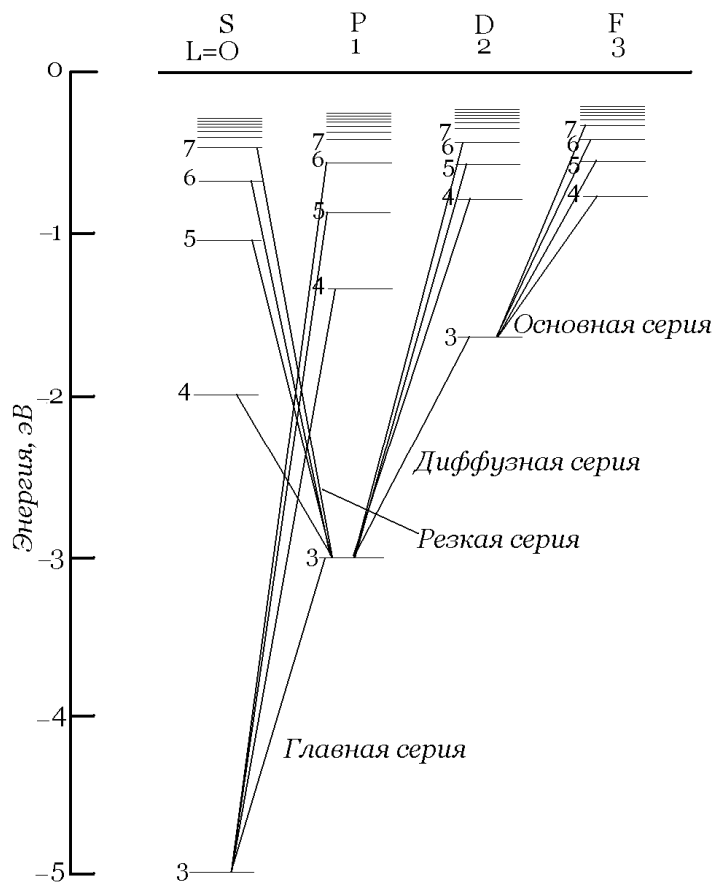


Рисунок 2.5 – Спектры испускания щелочных металлов

В спектрах испускания щелочных металлов (рисунок 2.5) наблюдается главная серия, которая возникает при переходах валентного электрона из различных возбуждённых  $p$ -состояний в основное, невозбуждённое  $s$ -состояние. При переходе электрона в  $s$ -состояние из ближайшего  $p$ -состояния спектральная линия главной серии имеет максимальную интенсивность. Например, для  $Na$  эта линия соответствует переходу  $3p \rightarrow 3s$ , (см. рисунок 2.5) для всех линий главной серии:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Терм атома записывается следующим образом:  $^{2S}L_J$ , где  $S$  – результирующее спиновое квантовое число,  $L$  – результирующее орбитальное квантовое число.

Гиромагнитное отношение для орбитальных моментов атома:

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

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

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

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

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

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

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

Проекция магнитного момента атома на направление  $OZ$ :

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

При построении векторной модели механические и магнитные моменты атома изображаются в виде направленных отрезков. Строго говоря, вследствие неопределенности направлений векторов  $\vec{L}$  в пространстве такой прием не является правомерным. Поэтому такая модель условна (рисунок 2.6).

Проекция вектора  $\vec{\mu}_J$  на направление  $\vec{L}_J$  равна (рисунок 2.6):

$$\mu_\tau = -|\vec{\mu}_L| \cos \alpha - |\vec{\mu}_S| \cos \beta,$$

$$\cos \alpha = \frac{L_J^2 + L_L^2 - L_S^2}{2L_J L_L} = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)} \cdot \sqrt{L(L+1)}},$$

$$\cos \beta = \frac{L_J^2 + L_S^2 - L_L^2}{2L_J L_S} = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1)} \cdot \sqrt{S(S+1)}},$$



тогда

$$\mu_J = -\mu_B \sqrt{L(L+1)} \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{L(L+1)}} -$$

$$- 2\mu_B \sqrt{S(S+1)} \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{S(S+1)}},$$

или

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

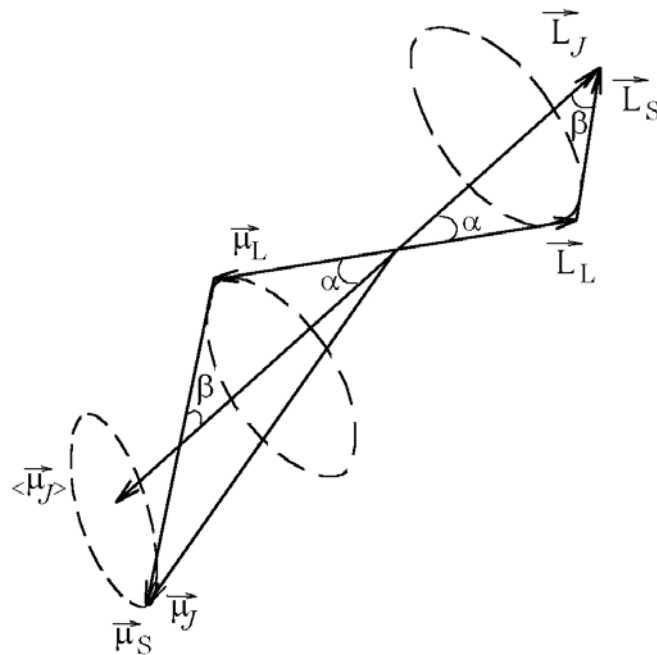


Рисунок 2.6 – Векторная модель механических и магнитных моментов атома

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

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

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

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

## 2.4.2 Примеры решения задач

**Задача 1.** Найти наиболее вероятное расстояние от ядра для электрона в состояниях: а)  $1s$ , б)  $2s$ , в)  $2p$  при  $m = 0$ .

Дано:

а)  $1s, n = 1, l = 0$

б)  $2s, n = 2, l = 0$

в)  $2p, n = 2, l = 1, m = 0$

$r_1 = \hbar^2 / me^2 = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$

$r_{\text{вер}} - ?$

*Решение.* Вероятность  $dP$  того, что электрон находится в данный момент в элементарном объеме  $dV$  равна  $dP = |\psi|^2 dV$ . В сферической системе координат  $dV = 4\pi r^2 dr$  представляет собой объем сферического слоя толщиной  $dr$ , находящегося на расстоянии  $r$  от начала координат, в котором помещено ядро.

Плотность вероятности  $f(r) = dP/dr = 4\pi r^2 |\psi|^2$  определяет пространственное распределение вероятности электрона в атоме водорода. Эта функция обращается в нуль в начале координат и экспоненциально убывает при больших  $r$ . С наибольшей вероятностью электрон находится в точке, для которой  $f(r)$  достигает максимального значения. Чтобы определить координату этой точки, следует производную функции  $f(r)$  приравнять нулю и из полученного уравнения найти значение  $r_{\text{вер}}$ , при котором в данном состоянии  $f(r)$  имеет максимальное значение.

Рассмотрим вариант а). Аналитический вид волновой функции (таблица 2.1) в состоянии  $1s$  ( $n = 1, l = 0, m = 0$ ):  $\psi_{100} = A_1 e^{-r/r_1}$ , где  $A_1$  – нормировочный множитель,  $r_1$  – радиус первой боровской орбиты. Вероятность нахождения электрона в области сферического слоя радиусом  $r$  и толщиной  $dr$  определится как  $dP_{100} = A_1^2 e^{-2r/r_1} 4\pi r^2 dr$ .

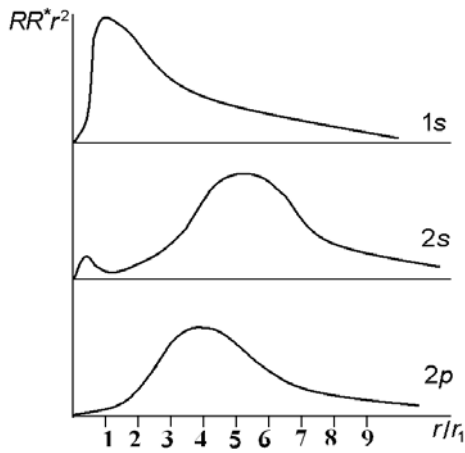


Рисунок. 2.7 – Вероятность нахождения электрона на расстояниях от ядра, кратных первой боровской орбите

Плотность вероятности  
 $f(r) = A_1^2 e^{-2r/r_1} 4\pi r^2$ . Продифференцируем полученную функцию по  $r$  и приравняем результат нулю:

$$4\pi A_1^2 \left( 2r - 2r^2/r_1 \right) \cdot e^{-2r/r_1} = 0,$$

отсюда:  $1 - r/r_1 = 0$  т.е.  $r_{\text{вер}} = r_1$  В состоянии  $1s$  с наибольшей вероятностью электрон находится в точках, соответствующих первой боровской орбите (рисунок 2.7,а).

Рассмотрим вариант б). Аналитический вид волновой функции для электрона в атоме водорода (таблица 2.1) в состоянии  $2s$  ( $n = 2, l = 0, m = 0$ ):  $\psi_{200} = A_2 (1 - r/2r_1) \cdot e^{r/2r_1}$  тогда плотность вероятности для этого состояния  $f(r) = dP_{200} / dr = A_2^2 (1 - r/2r_1)^2 e^{-r/r_1} 4\pi r^2$ . Продифференцируем функцию  $f(r)$  по  $r$  и приравняем результат нулю:

$$\begin{aligned} df/dr = 4\pi A_2^2 \left[ -1/r_1 (1 - r/2r_1)^2 r^2 + \right. \\ \left. + 2(1 - r/2r_1)(-1/2r_1)r^2 + 2(1 - r/2r_1)^2 r^2 \right] e^{-r/r_1} = 0. \end{aligned}$$

В итоге получим:  $(1/2) \cdot (r/r_1)^2 - 3(r/r_1) + 2 = 0$ . Квадратное уравнение имеет два корня:  $r/r_1 = 5,4; r/r_1 = 0,6$ , т.е.  $r_{\text{вер}1} = 5,4r_1$  и  $r_{\text{вер}2} = 0,6r_1$  (рисунок 2.7,б). В классической теории Бора данному состоянию соответствует движение электрона по эллипсу.

Рассмотрим вариант в). Аналитический вид волновой функции в состоянии  $2p$  ( $n = 2, l = 0, m = 0$ ):  $\psi_{210} = A_3 r e^{-r/2r_1}$ , плотность вероятности  $f(r) = dP_{210} / dr = 4\pi A_3^2 r^4 e^{-r/r_1}$ .

Найдем наиболее вероятное значение  $r$ :  $df/dr = 0$ , следовательно,  $4\pi A_3^2 \left( \frac{-1}{r_1} r^4 + 4r^3 \right) \cdot e^{-r/r_1} = 4\pi A_3^2 \left( 4 - \frac{r}{r_1} \right) \cdot e^{-r/r_1} = 0$ , тогда  $r = 4r_1$ .

Это соответствует радиусу второй круговой боровской орбиты (рисунок 2.7,в).

Таким образом, с точки зрения квантовой физики боровские орбиты соответствуют геометрическому месту точек, в которых электрон находится с наибольшей вероятностью.

**Ответ:** а)  $r_{\text{вер}} = r_1$ , б)  $r_{\text{вер1}} = 5,4r_1$ ,  $r_{\text{вер2}} = 0,6r_1$ , в)  $r_{\text{вер}} = 4r_1$ .

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

<p>Дано:</p> <p><math>2p (n=2, l=1)</math></p> <p><math>4f (n=4, l=3)</math></p> <p><math>\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}</math></p> <p><math>E_n - ? \quad L^2 - ? \quad L_z - ?</math></p>	<p><i>Решение.</i> Квантовое состояние электрона в атоме водорода задается главным квантовым числом <math>n</math>, которое определяет энергию электрона в атоме водорода</p> <p><math>E_n = -e^4 m_e / (8\varepsilon_0^2 h^2 n^2)</math>; орбитальным квантовым числом <math>l = 0, 1, 2, \dots, n-1</math>, которое определяет квадрат орбитального момента импульса электрона: <math>L^2 = l(l+1)\hbar^2</math>; и магнитным квантовым числом <math>m = 0, \pm 1, \dots, \pm l</math>, которое определяет проекцию момента импульса на направление <math>Z</math>: <math>L_z = m\hbar</math>, где <math>m = 0, \pm 1, \dots, \pm l</math>.</p>
--	---

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

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

$E_2 = -e^4 m_e / (8\varepsilon_0^2 h^2 n^2)$ , а в эВ энергия равна

$$E_2 = -e^3 m_e / (8\varepsilon_0^2 h^2 n^2) = \frac{-(1,6 \cdot 10^{-19})^3 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}{(8 \cdot 8,6 \cdot 10^{-12})^2 (6,62 \cdot 10^{-34})^2 \cdot 4} = -13,6/4 \text{ эВ} = -3,4 \text{ эВ}.$$

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

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

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

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

Проекция на ось  $OZ$  определяется из условия  $L_z = m\hbar$ , где  $m = 0, \pm 1$ , т.е. имеет три значения:  $L_z = 0$ ,  $L_z = \hbar$ ,  $L_z = -\hbar$ . После подстановки численных значений, запишем  $L_z = 0; 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}; -1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ .

Момент импульса является вектором. Однако вследствие волновых свойств электрона одновременно все три его проекции  $L_x, L_y, L_z$  заданы быть не могут. Вполне определённое значение имеет лишь модуль вектора  $|\vec{L}|$  и одна из его проекций  $L_z$ , которую мы определили. Квантовое число  $m$  характеризует ориентацию момента импульса в пространстве. Различные ориентации вектора  $\vec{L}$  для данного случая показаны на рисунке 2.8,а. Вектор  $\vec{L}$  для различных значений  $m$  при заданном  $l$  изображен стрелками. Его положение в пространстве квантуется:  $\cos \alpha = m / \sqrt{l(l+1)}$ .

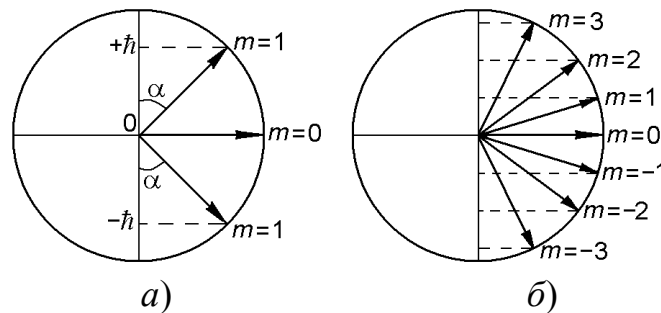


Рисунок 2.8 – Ориентации орбитального момента импульса в пространстве для различных значений  $m$

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

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

Квадрат момента импульса для  $l = 3$ :  $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ ;  $L^2 = 3 \cdot 4\hbar^2 = 12\hbar^2$ . Проекции момента импульса на ось  $OZ$  равны  $L_z = m\hbar$ , где  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ . Таким образом,  $L_z$  принимают 7 значений:  $L_z = 0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$ .

Вектор  $\vec{L}$  показан на рисунке 2.8,б для различных значений  $m$  при  $l = 3$  стрелками.

Подставим в формулы численные значения:  
 $E_4 = -13,6/4 = -0,85$  эВ.

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

$$L_z = 0; \quad L_z = \pm 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}; \quad L_z = \pm 2,11 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с};$$

$$L_z = \pm 3,16 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

**Ответ:** а)  $E_2 = -3,4$  эВ;  $L^2 = 2,22 \cdot 10^{-68} \text{ Дж}^2 \cdot \text{с}^2$ ;

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

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

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

Дано:

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

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

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

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

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

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

Состояние атома в квантовой механике считается заданным, если известны орбитальное  $L$ , спиновое  $S$  и полное  $J$  квантовые числа для атома. Атом водорода содержит один электрон, и его состояние определяется квантовым состоянием этого электрона, т.е. его квантовыми числами  $L, S, J$ . Информацию о квантовых числах атома можно получить, если условно записать терм атома следующим образом  ${}^{2S+1}L_J$ , где под  $L$  понимают одну из букв латинского алфавита  $S, P, D, F$  и т.д., которые соответствуют значениям орбитального квантового числа  $L = 0, 1, 2, 3$  и т.д. Правый нижний индекс дает

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

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

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

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

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

**Ответ:** Переходы  ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$ ,  ${}^2D_{5/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$  запрещены правилами отбора.

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

**Задача 4.** Потенциал ионизации атома лития  $\varphi_i = 5,39 \text{ В}$ , первый потенциал возбуждения  $\varphi_1 = 1,85 \text{ В}$ . Найти ридберговские поправки.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Подставим численные значения:

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



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

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

**Задача 5.** Сколько и какие значения квантового числа  $J$  может иметь атом в состоянии с квантовыми числами  $S = 2$ ,  $L = 3$ ? Найти возможные значения полных механических и полных магнитных моментов в этих состояниях.

*Решение.* Квантовое число полного момента импульса  $J$  принимает значения  $J = S + L; S + L - 1 \dots |L - S|$ , при этом изменение  $J$  происходит в соответствии правилом отбора:  $\Delta J = 0; \pm 1$ . Полный механический момент атома равен:  $L_J = \hbar \sqrt{J(J+1)}$ . Полный магнитный момент атома:  $\mu_J = -\mu_B g \sqrt{J(J+1)}$ , где фактор Ланде  $g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$ .

При  $S = 2$ ,  $L = 3$  квантовое число  $J$  принимает всего 5 значений: 5, 4, 3, 2, 1. Для этих значений  $J$  находим:  $L_J = \hbar \sqrt{30}$ ;  $\hbar \sqrt{20}$ ;  $\hbar \sqrt{12}$ ;  $\hbar \sqrt{6}$ ;  $\hbar \sqrt{2}$ .

Находим значения фактора Ланде:

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

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

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

Тогда значения магнитных моментов:

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

$$\mu_{J=3} = -\mu_B \frac{5}{4} \sqrt{12}; \quad \mu_{J=2} = -\mu_B \sqrt{6}; \quad \mu_{J=1} = 0.$$

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

$$\mu_{J=5} = -\mu_B \frac{13}{10} \sqrt{30}; \quad \mu_{J=4} = -\mu_B \frac{27}{20} \sqrt{20}; \quad \mu_{J=3} = -\mu_B \frac{5}{4} \sqrt{12};$$

$$\mu_{J=2} = -\mu_B \sqrt{6}; \quad \mu_{J=1} = 0.$$

**Задача 6.** Некоторый атом кроме заполненных оболочек имеет три электрона ( $s$ ,  $p$  и  $d$ ) и находится в состоянии с максимально возможным для этой конфигурации полным механическим моментом. Найти в соответствующей векторной модели атома угол между спиновым и полным механическими моментами данного атома.

Дано:  $s, p, d$   
 $L_J = L_{J_{\max}}$   
 $\alpha - ?$

*Решение.* В векторной модели атома векторы  $\vec{L}_J$ ,  $\vec{L}_L$ ,  $\vec{L}_S$  складываются геометрически (рисунок 2.9). Согласно теореме косинусов  $L_L^2 = L_J^2 + L_S^2 - 2L_J L_S \cos \alpha$ ,

отсюда искомый угол между векторами  $\vec{L}_J$  и  $\vec{L}_S$  найдем из соотно-

$$\text{шения } \cos \alpha = \frac{L_J^2 + L_S^2 - L_L^2}{2L_J L_S}, \quad \text{где } L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}; \quad L_S = \hbar\sqrt{S(S+1)},$$

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

В атоме имеется три электрона в  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -состояниях. Для  $s$ -электрона  $l=0$  и  $L_l=0$ ; для  $p$ -электрона  $l=1$  и  $L_l=\hbar\sqrt{2}$ ; для  $d$ -электрона  $l=2$  и  $L_l=\hbar\sqrt{6}$ . Согласно правилам Хунда минимальной энергией обладает состояние с максимальным спиновым моментом атома, т.е. спины всех электронов параллельны и  $S=3 \cdot 1/2 = 3/2$ , тогда

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

Согласно условию задачи полный момент импульса атома  $L_J$  максимален, кроме того, мы установили, что спиновый момент тоже максимален, тогда орбитальный момент атома максимален с квантовым числом  $L=0+1+2=3$ ,  $L_{L_{\max}} = \hbar\sqrt{12}$ , поэтому  $J_{\max} = L + S = 3 + 3/2 = 9/2$  и  $L_{J_{\max}} = \hbar\sqrt{90}/2$ .

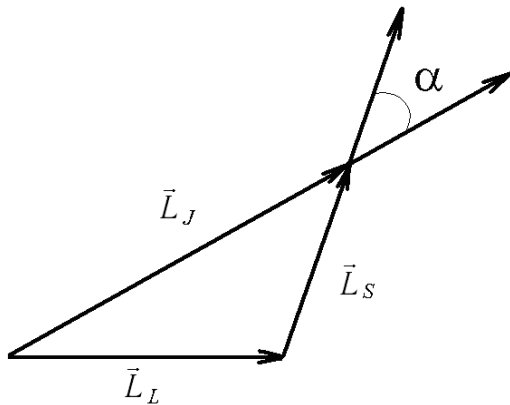


Рисунок 2.9 – Векторная модель атома

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

$$\begin{aligned}\cos \alpha &= \frac{\hbar^2(J+1)J + \hbar^2 S(S+1) - \hbar^2 L(L+1)}{2\hbar^2 \sqrt{J(J+1) \cdot S(S+1)}} = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1) \cdot S(S+1)}} = \\ &= \frac{90 + 15 - 12 \cdot 4}{2\sqrt{90 \cdot 15}} = 0,78 \text{ и } \alpha = 42^\circ.\end{aligned}$$

**Ответ:**  $\alpha = 42^\circ$ .

### 2.4.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. Собственная функция  $1s$  состояния атома водорода имеет вид  $\psi(r) = Ae^{-r/r_1}$ , где  $r_1$  – первый боровский радиус. Найти среднее значение радиуса и среднее значение потенциальной энергии атома в этом состоянии.

2. Определить возможные значения орбитального момента импульса  $L_l$  электрона в возбужденном атоме водорода, если энергия возбуждения  $E = 12,09$  эВ.

3. Вычислить наименьший угол  $\alpha$ , который может образовать вектор  $\vec{L}_l$  орбитального момента импульса электрона в атоме водорода с направлением внешнего магнитного поля. Электрон находится в атоме в  $d$ -состоянии.

4. Выписать возможные спектральные обозначения термов атома водорода, электрон которого находится в состоянии с главным квантовым числом  $n = 3$ .

5. Атом водорода находится в состоянии, спектральный символ терма которого имеет вид  ${}^2D_{3/2}$ . Найти: а) орбитальный механический момент, б) спин, а также их проекции на направление поля в указанном состоянии.

6. Выразить через магнетон Бора орбитальный и спиновый магнитные моменты атома водорода в состояниях  ${}^2S_{1/2}$ ,  ${}^2P_{3/2}$ ,  ${}^2D_{5/2}$ ,  ${}^2F_{5/2}$ .

7. Основным для атома натрия является состояние  $3s$ . Ридберговская поправка для  $P$ -термов  $\sigma_p = -0,87$ . Длина волны резонансной линии, обусловленной переходом  $3P \rightarrow 3S$ , равна  $\lambda = 590$  нм. Найти потенциал возбуждения  $\phi_1$  атома натрия.

8. Потенциал ионизации атома цезия  $\varphi_i = 3,89$  В. Основным является состояние  $6S$ . Найти ридберговскую поправку  $\sigma_S$  к  $S$ -термам.

9. Найти максимально возможный полный механический момент и соответствующее спектральное обозначение терма атома: а) натрия, валентный электрон которого имеет главное квантовое число  $n = 4$ ; б) с электронной конфигурацией  $1s^2 2p3d$ .

10. Состояние атома характеризуется квантовыми числами  $L$  и  $S$ , равными: а) 2 и 2; б) 3 и 2; в) 2 и 3; г) 1 и  $3/2$ . Написать возможные значения квантового числа  $J$  при данных значениях  $L$  и  $S$ .

### Тестовые задания

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

Варианты ответов:

1)  $L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ ; 2)  $L_Z = \hbar m$ ; 3)  $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ ; 4)  $L = \hbar\sqrt{S(S+1)}$ , где  $J, m, l, S$  – квантовые числа.

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

Варианты ответов:

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

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

Варианты ответов:

1) 1; 2) 2; 3) 3; 4) 4; 5) 5.

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

Варианты ответов:

1) 9; 2) 3; 3) 1; 4)  $1/3$ ; 5)  $1/9$ .

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

а)  $\Psi_{210 \pm \frac{1}{2}}$ ; б)  $\Psi_{111 \pm \frac{1}{2}}$ ; в)  $\Psi_{110 \pm \frac{1}{2}}$ ; г)  $\Psi_{200 \pm \frac{1}{2}}$ ; д)  $\Psi_{100 \pm \frac{1}{2}}$ ; е)  $\Psi_{22 \pm 1 \pm \frac{1}{2}}$ .

Варианты ответов:

- 1) в, д;      2) а, е;      3) а, в;      4) а, г;      5) б, в.

#### 2.4.4 Задачи для самостоятельного решения

1. Пси-функция некоторой частицы имеет вид  $\psi(r) = Ae^{-r/r_1} / 2$ , где  $r$  – расстояние частицы от силового центра,  $A$  – константа. Найти а) значение коэффициента  $A$ ; б) среднее расстояние  $\langle r \rangle$  частицы от центра.

2. Чему равен квадрат орбитального момента импульса в состоянии а)  $3p$ ; б)  $5f$ ?

3. Написать возможные значения квантового числа  $j$  при значениях  $l =$ : а) 0; б) 1; в) 2; г) 3 для атома водорода.

4. Написать символы возможных термов атома водорода для состояний а)  $l = 0$ ; б)  $l = 1$ ; в)  $l = 2$ ; г)  $l = 3$ .

5. Какие из термов, описывающих состояния электрона в атоме водорода, написаны неверно:  ${}^2S_{1/2}$ ,  ${}^2P_{3/2}$ ,  ${}^2D_{7/2}$ ,  ${}^3F_4$ ,  ${}^2F_{7/2}$ ,  ${}^3F_3$ ,  ${}^3S_1$ ?

6. Атом водорода, находится в состоянии, полный механический момент которого  $L_z = \sqrt{63} \hbar / 2$ . Какие значения может иметь квантовое число  $l$  этого состояния?

7. Выразить через магнетон Бора магнитный момент  $\mu$  атома в состояниях  ${}^3S_1$ ;  ${}^1P_0$ ;  ${}^1P_1$ ;  ${}^4D_{1/2}$ ;  ${}^5F_1$ ;  ${}^7H_2$ .

8. Основным состоянием атома натрия является состояние  $3s$ . Ридберговская поправка для  $S$ -термов равна  $\sigma_S = -1,35$ . Исходя из этих данных, вычислить энергию ионизации  $E_i$  атома.

9. Вычислить множитель Ланде  $g$  для атомов с одним валентным электроном в состояниях  $S$  и  $P$ .

10. Энергия связи валентного электрона атома лития в состояниях  $2S$  и  $2P$  равна 5,39 эВ и 3,54 эВ соответственно. Вычислить ридберговские поправки для  $S$ - и  $P$ -термов этого атома.

#### Тестовые задания

1. Какая из предложенных формул определяет орбитальный момент импульса электрона в атоме водорода?

Варианты ответов:

1)  $L_J = \hbar\sqrt{J(J+1)}$ ; 2)  $L_Z = \hbar m$ ; 3)  $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ ; 4)  $L = \hbar\sqrt{S(S+1)}$ ,  
где  $J, m, l, S$  – квантовые числа.

2. Чему равна в магнетонах Бора проекция на ось  $Z$  спинового магнитного момента электрона в атоме водорода?

Варианты ответов:

1) 3;            2) 1;            3) 2;            4) 0,5.

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

Варианты ответов:

1) 1;            2) 2;            3) 3;            4) 4;            5) 5.

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

Варианты ответов:

1)  $\mu = \frac{e}{2m} L_l$ ;            2)  $\mu = \frac{e}{2m} g L_j$ ;            3)  $\mu = \frac{e}{m} L_s$ ,

где  $L_l, L_j, L_s$  – орбитальный, полный и собственный механические моменты импульса электрона.

5. Чему равно отношение энергии электрона в основном состоянии в атоме водорода к энергии этого же электрона во втором возбужденном состоянии в атоме водорода?

Варианты ответов:

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

### 2.4.5 Вопросы для самоконтроля

1. Что характеризует главное квантовое число  $n$ ?
2. Что характеризуют орбитальное и магнитное квантовые числа?
3. От чего зависят собственный момент импульса (спин)  $L_s$  электрона и его проекция на ось  $Z$ ?
4. Какой наименьший отличный от нуля момент импульса  $L_{\min}$  встречается в природе? Перечислить объекты, обладающие таким моментом.
5. От чего зависит величина полного момента импульса  $L_j$  электрона в атоме водорода?

6. Как выглядит правило отбора по квантовому числу  $j$ ?
7. Как выглядит правило отбора по квантовому числу  $l$ ?
8. Какие состояния называются вырожденными?
9. Что такое терм атома? Чем он определяется?
10. Как определяется результирующий (полный) механический момент атома  $\vec{L}_J$ ?
11. Как выглядит гиромагнитное отношение для орбитальных моментов атома?
12. Как выглядит гиромагнитное отношение собственных (спиновых) моментов?
13. Как выглядит гиромагнитное отношение полных моментов атома?
14. Что такое множитель Ланде? По какой формуле он определяется?
15. В чем заключается правило заполнения состояний в многоэлектронных атомах? Сформулируйте эмпирические правила Хунда.

## 3 ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ

### 3.1 Краткая теория

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

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

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

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

*К фермионам* относятся частицы с полуцелым спином ( $\pm\hbar/2$ ) (электроны, протоны, нейтроны, дырки...).

Фермионы – ярко выраженные индивидуалисты, подчиняющиеся принципу Паули (в данной системе тождественных фермионов любые два из них не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии).

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

Бозоны – коллективисты, стремятся к объединению.

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

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

**Условие не вырожденности:**  $\frac{N}{G} \ll 1$ .



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

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

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

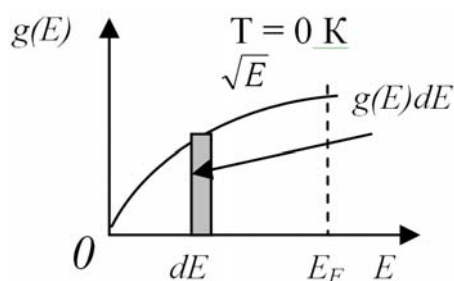
Функция  $f(E)$  – называется функцией распределения (*вероятность обладать данным значением энергии  $E$* ). Ее можно трактовать как среднее число частиц, находящихся в данном состоянии ( $f(E) = 0,1$  – на десять состояний приходится одна частица).

**Число состояний**  $g(E)dE = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} \cdot dE$ , где  $V$  – объем кристалла.

Это и есть число состояний микрочастиц в интервале энергий  $dE$ , заключенных между  $E$  и  $(E + dE)$  (без учета спина).

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

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



**Плотность состояний** – число состояний в единичном интервале энергий

$$g(E) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (3.1)$$

Плотность состояний зависит от массы частицы.

Общее число состояний от 0 до  $E_F$ :

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

Энергия Ферми:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}. \quad (3.2)$$

Концентрация частиц:

$$n = \frac{(2mE_F)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3}. \quad (3.3)$$

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

Температура, соответствующая энергии Ферми, это температура вырождения  $T_B = \frac{E_F}{k}$ .

Средняя энергия электронов проводимости в металле

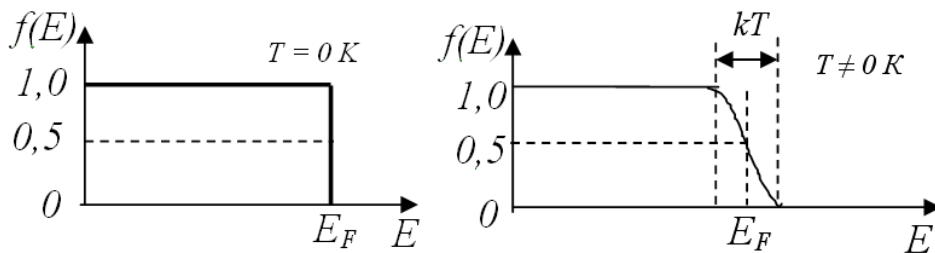
$$\langle E \rangle = 0,6E_F. \quad (3.4)$$

Давление электронного газа

$$P = \frac{2}{5} E_F n. \quad (3.5)$$

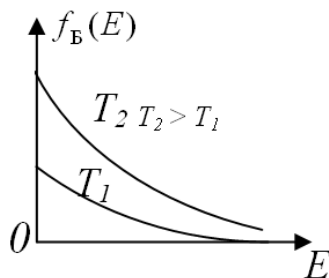
**Функция распределения Ферми – Дирака (для фермионов)**

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}. \quad (3.6)$$



**Функция распределения Бозе – Эйнштейна (для бозонов)**

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - 1}, \quad (3.7)$$



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

### 3.2 Примеры решения задач

**Задача 1.** Какова вероятность заполнения электронами в металле энергетического уровня, расположенного на 6 мэВ ниже уровня Ферми при температуре  $T = 126$  К?

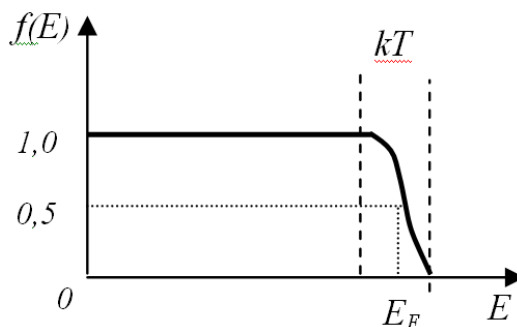
Дано:  
 $(E - E_F) = -6 \cdot 10^{-3}$  эВ,  
 $T = 126$  К  
 $\langle N(E) \rangle = ?$

Решение.

а) Определить вероятность заполнения электронами в металле энергетического

уровня  $E$  при температуре  $T$  – это значит определить среднее число фермионов  $\langle N \rangle$  в каждом квантовом состоянии с заданными значениями энергии  $E$  и температуры  $T$ .

б) Распределение Ферми – Дирака (3.6) как раз позволяет рассчитать искомую величину



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

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

г) окончательно имеем:

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

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

Получили, что среднее **число фермионов меньше 1** (!?) Это означает, что на 1000 энергетических состояний приходится 635 фермионов.

**Задача 2.** Вычислить максимальную энергию, которую могут иметь свободные электроны в металле (медь) при температуре  $T = 0$  К. Принять, что на каждый атом меди приходится по одному

валентному электрону. Плотность меди  $\rho$  принять равной  $8,9 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ . Молярная масса меди  $\mu = 64 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$ .

Дано:

$$T = 0 \text{ К},$$

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

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

$$E_F = ?$$

формулой (3.3)

*Решение.*

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

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

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

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

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

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

в) Подставляя (2) в (1), получаем

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

г) Произведём вычисления

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

**Ответ:**  $E_F = 7,4 \text{ эВ}$ .

**Задача 3.** Найти среднее число фотонов в одном состоянии при температуре  $T = 15 \text{ К}$ , длина волны которых равна  $2200 \text{ мкм}$ .

Дано:

$$T = 15 \text{ К},$$

$$\lambda = 2200 \text{ мкм} = 2,2 \cdot 10^{-3} \text{ м}$$

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

*Решение.*

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

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

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

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

в) С учётом (2) функция распределения принимает вид

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

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

г) Подставляя числовые данные, имеем:

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

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

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

Дано:

$$T = 0 \text{ К};$$

$$E_{F1} = 11,7 \text{ эВ};$$

$$E_{F2} = 7,0 \text{ эВ};$$

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

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

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

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

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

*Решение.*

а) Искомое отношение можно выразить через отношение концентраций

$$\left(\frac{n_e}{n_a}\right)_1 / \left(\frac{n_e}{n_a}\right)_2; \quad (1)$$

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

(3.3)

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

г) Концентрацию атомов металла определим по формуле

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

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

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

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

е) Окончательно имеем расчётную формулу:

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

Подстановка числовых данных даёт искомое отношение

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

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

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

Дано:

$$V_1 = 56 \text{ см}^3,$$

$$V_2 = 29 \text{ см}^3,$$

$$E_1 = 5 \text{ эВ},$$

$$E_2 = 13 \text{ эВ}$$

$$\frac{g(E_1)}{g(E_2)} = ?$$

*Решение.*

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

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

$$A = 4\pi \left(\frac{\sqrt{2m}}{h}\right)^3 = 1,06 \cdot 10^{56} \text{ м}^{-3} \cdot \text{Дж}^{-3/2}; \quad V - \text{объём образца; } m - \text{масса электрона.}$$

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

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

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

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

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

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

### 3.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. Определить энергию Ферми (в эВ) некоторого металла при температуре абсолютного нуля, если концентрация электронов проводимости в этом металле равна  $58 \cdot 10^{21} \text{ 1/см}^3$ .

2. Найти в эВ среднюю энергию электронов проводимости в металле при температуре абсолютного нуля, если их концентрация равна  $140 \cdot 10^{20} \text{ 1/см}^3$ .

3. Плотность состояний для электронов в кристалле некоторого металла для энергии, равной 10 эВ при температуре абсолютного нуля равна  $464 \cdot 10^{36} \text{ с}^2/\text{м}^2 \cdot \text{кг}$ . Найти объем кристалла в кубических миллиметрах.

4. Оценить в мегапаскалях давление электронного газа в некотором металле при абсолютном нуле, энергия Ферми которого равна 13 эВ, если концентрация электронного газа равна  $287 \cdot 10^{26} \text{ 1/м}^3$ .

5. Найти в эВ максимальную энергию, которой могут обладать свободные электроны в металле при абсолютном нуле. Принять, что на каждый атом металла приходится по одному электрону. Массовое число металла равно 67, а плотность металла равна  $8737 \text{ кг/м}^3$ .

6. Какая часть свободных электронов в металле имеет при абсолютном нуле кинетическую энергию, превышающую  $1/8$  максимальной?

7. Концентрация свободных электронов в металле равна  $1387 \cdot 10^{20} \text{ 1/см}^3$ . Найти скорость электронов на уровне Ферми.

8. До какой температуры надо было бы нагреть классический электронный газ, чтобы его средняя энергия оказалась равной средней энергии электронов в металле при абсолютном нуле? Принять, что на каждый атом приходится один электрон. Плотность металла равна  $8522 \text{ кг/м}^3$ , а массовое число равно 65.

9. Определить температуру, при которой в твердом проводнике вероятность найти электрон с энергией 0,44 эВ над уровнем Ферми, равна 1,05 %.

10. Найти среднее число фотонов в одном состоянии при температуре 15 К, длина волны которых равна 2218 мкм.

### Тестовые задания

1. Энергия Ферми ...

а) максимальная энергия электронов в металле при  $T = 0$  К;

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

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

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

Варианты ответов:

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

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

Варианты ответов:

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

3. Температура вырождения определяет ...

а) температуру кристалла в условиях эксперимента;

б) границу, выше которой начинают проявляться квантовые эффекты;

в) границу, выше которой квантовые эффекты перестают быть существенными;

г) температуру, соответствующую энергии Ферми.

Варианты ответов:

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

4. Укажите **верные** утверждения:

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

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

в) бозоны подчиняются принципу Паули;

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



Варианты ответов:

- 1) а, б;            2) а, в;            3) в, г;            4) а, в;  
5) б, г;            6) в, г;            7) б, в.

5. Укажите верные утверждения

- а) нуклоны и фотоны относятся к классу бозонов;  
б) нуклоны и фотоны относятся к классу фермионов;  
в) химический потенциал бозонов равен нулю;  
г) Фермионы и бозоны достаточно больших энергий подчиняются статистике Максвелла – Больцмана;  
д) плотность состояний для бозонов в два раза меньше, чем для фермионов.

Варианты ответов:

- 1) а в;                    2) а, г;                    3) б, г;                    4) б, д;  
5) а, б, в ;                6) б, в, г;                7) в, г, д.

### 3.4 Задачи для самостоятельного решения

1. Определить температуру вырождения электронного газа в металле, если концентрация электронов равна  $53 \cdot 10^{27} \text{ 1/м}^3$ .

2. Какова вероятность заполнения электронами в металле энергетического уровня, расположенного на 44 мэВ выше уровня Ферми при температуре 276 К?

3. Найти среднее число фотонов в состоянии с энергией 77 мэВ при температуре 655 К.

4. Чему равен интервал энергии (в эВ) между соседними энергетическими уровнями свободных электронов в кристалле металла объемом  $15 \text{ см}^3$  для значения энергии, равной 3 эВ?

5. В кристалле при энергии 10 эВ плотность состояний равна  $8 \cdot 10^{40} \text{ с}^2/\text{м}^2 \cdot \text{кг}$ . Чему равна плотность состояний для энергии 13 эВ?

6. При температуре абсолютного нуля в кристалле некоторого металла объемом  $41 \text{ см}^3$  плотность состояний для электронов составляет  $117 \cdot 10^{40} \text{ с}^2/\text{м}^2 \cdot \text{кг}$ . Для какой энергии (в эВ) определена данная плотность состояний?

7. Концентрация свободных электронов проводимости в металле равна  $1757 \cdot 10^{20} \text{ 1/см}^3$ . Найти дебройлевскую длину волны (в нм) для электронов, находящихся на уровне Ферми при абсолютном нуле.

8. Определить максимальную скорость электронов в металле при абсолютном нуле, если энергия Ферми для него равна 5 эВ.

9. Определить в СИ значение полной энергии электронного газа, занимающего объем  $417 \text{ см}^3$  в кристалле некоторого металла при абсолютном нуле, энергия Ферми которого равна  $9 \text{ эВ}$ .

10. Определить число фотонов с частотами, заключенными в интервале от  $641 \text{ ТГц}$  до  $648 \text{ ТГц}$  в объеме  $330 \text{ см}^3$  при температуре  $303 \text{ К}$ .

### Тестовые задания

1. Выберите правильный вариант ответа:

Статистика Бозе-Эйнштейна – это ...

Варианты ответов:

1) статистический метод описания физических систем, содержащих большое число невзаимодействующих частиц, движущихся по законам классической механики;

2) квантовая статистика, применяемая к системам частиц с полужелым спином, подчиняющихся принципу запрета Паули;

3) определяет распределение тождественных частиц с нулевым или целочисленным спином.

2. Система имеет  $G$  состояний, которые могут быть заполнены  $N$  частицами. Укажите, в каком случае поведение коллектива частиц можно описывать с помощью статистики Максвелла – Больцмана?

Варианты ответов:

1)  $\frac{N}{G} = 0$ ;      2)  $\frac{N}{G} \ll 1$ ;      3)  $\frac{N}{G} \approx 1$ ;      4)  $\frac{N}{G} \rightarrow \infty$ .

3. В каком из перечисленных ниже случаев электронный газ будет вырожденным? ( $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура,  $E_F$  – энергия Ферми,  $\theta$  – температура Дебая).

Варианты ответов:

1)  $k \cdot T \gg E_F$ ;      2)  $k \cdot T \ll E_F$ ;

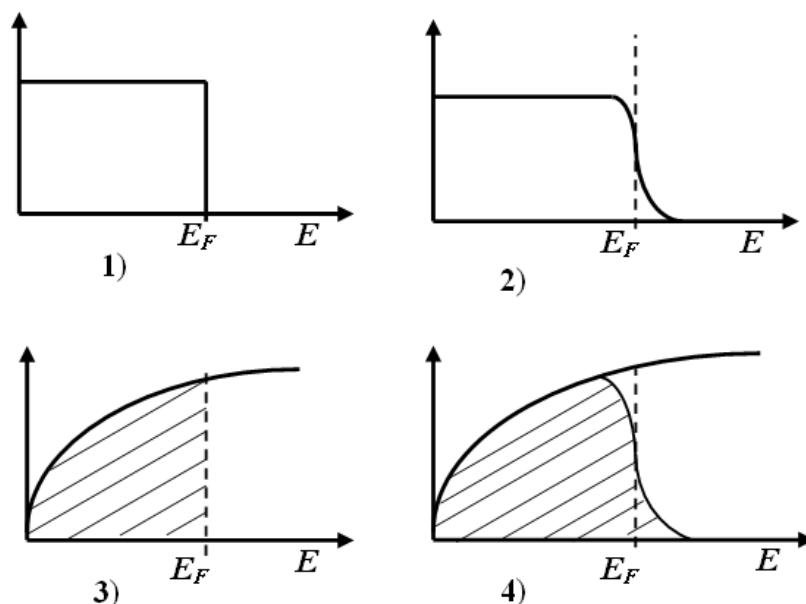
3)  $T \gg \theta$ ;      4)  $T \ll \theta$ .

4. Чему равна вероятность заполнения уровня Ферми при абсолютном нуле?

Варианты ответов:

1) 0;      2) 1/2;      3) 3/4;      4) 1.

5. Укажите номер рисунка, на котором изображена зависимость полной функции распределения  $N(E)$  для фермионов от энергии при температуре отличной от нуля.



Варианты ответов:

1) 1;      2) 2;      3) 3;      4) 4.

### 3.5 Вопросы для самоконтроля

1. В чем принципиальное отличие квантовой статистики от классической?

2. Какие физические объекты описываются статистикой Ферми – Дирака?

3. Какие физические объекты описываются статистикой Бозе – Эйнштейна?

4. Что такое Бозе-конденсация?

5. Физический смысл химического потенциала. Чем определяется химический потенциал? Зависит ли он от энергии?

6. Какая система частиц называется вырожденной? Какие необходимы условия для перехода системы частиц из вырожденного состояния в не вырожденное?

7. При каких условиях к электронам в металле можно применить классическую статистику, а когда только квантовую?

8. Что такое критерий вырождения и температура вырождения?

9. Какой энергетический уровень называется уровнем Ферми?

10. Чем отличается бозе-газ от ферми-газа?

11. Что такое фазовое пространство? Фазовый объем?

12. Химический потенциал в распределении Ферми – Дирака и распределении Бозе – Эйнштейна. В чем различие?

13. При каких условиях распределение Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака переходят в классическое распределение Максвелла – Больцмана?

14. Собственные значения волновой  $\Psi$ -функции при решении уравнения Шредингера должны удовлетворять стандартным условиям. Перечислите их.

15. В каком случае при вычислении плотности состояния необходимо удваивать результат?

## 4 ЭЛЕМЕНТЫ ФИЗИКИ ТВЁРДОГО ТЕЛА

### 4.1 Тепловые свойства твёрдых тел

#### 4.1.1 Краткая теория

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

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

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

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

Энергия нормального колебания решетки – это энергия гармонического осциллятора  $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ ,  $n = 0, 1, \dots$  – колебательное квантовое число,  $\hbar$  – постоянная Планка. Энергия осциллятора имеет лишь дискретные значения. Слагаемое  $\hbar\omega/2$  представляет энергию нулевых колебаний. Он показывает, что даже при  $T = 0$  К атомы не находятся в положениях равновесия, а совершают колебания.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp\left[\frac{\hbar\omega}{kT}\right] - 1}.$$

Средняя энергия нормальных колебаний:

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

где  $k$  – постоянная Больцмана.

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

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

Тогда энергия системы из  $N_A$  атомов

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

а молярная теплоёмкость

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

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

Формула Эйнштейна хорошо согласуется с экспериментом при  $T \approx \theta_E$ . При более низких температурах соответствия нет. Теплоёмкость, рассчитанная по Эйнштейну, падает с температурой быстрее, чем в действительности. Эксперимент показал, что при  $T \rightarrow 0$  теплоёмкость диэлектриков изменяется не экспоненциально, а как  $T^3$ . На рисунке 4.1 экспериментальная зависимость теплоемкости от темпе-

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

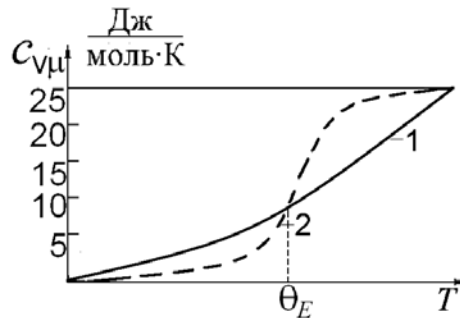


Рисунок 4.1 – Экспериментальная (1) и теоретическая по Эйнштейну (2) зависимости молярной теплоемкости твёрдого тела от температуры

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

$$E_{\text{реш.}} = \int_0^{\omega_D} \langle E_{\text{н.к.}} \rangle g(\omega) d\omega, \quad (4.1)$$

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

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

$$g(\omega) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2v^3} = \frac{9N\omega^2}{\omega_D^3}, \quad (4.2)$$

где  $v$  – усредненная по кристаллографическим направлениям и типам колебаний скорость звука;  $V$  – объем кристалла;  $N$  – число ато-



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

С учетом выражения (4.2) формулу (4.1) перепишем в виде

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

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

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

$$g(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{при } \omega > \omega_D, \\ \frac{3}{2\pi^2 v^3} \omega^2 = A\omega^2 & \text{при } \omega \leq \omega_{\max}, \end{cases} \quad (4.3)$$

что в сумме дает  $\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 3N$ . Это условие нормировки. В выражении (4.3)  $A$  не зависит от частоты и является постоянной.

Значение энергии решётки:

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

Это интерполяционная формула Дебая. Здесь  $\theta_D$  – характеристическая температура твердого тела, или температура Дебая. Ее физический смысл в том, что величина  $k\theta_D = \hbar\omega_{\max}$  представляет максимальный квант энергии, способный возбудить колебания решетки.

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

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

Для одного моля кристаллической решётки  $E_{\text{реш}\mu} = E_0 + 3RT$ , теплоемкость не зависит от температуры (закон Дюлонга и Пти):

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

Согласно закону Дюлонга и Пти при высоких температурах

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### Тепловое расширение твёрдых тел

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

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

где  $l_0$  – длина тела при  $0^\circ\text{C}$ ;  $l = l_0 + \Delta l = l_0 (1 + \alpha \cdot \Delta T)$ .

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

В результате линейного расширения увеличивается, и объем тела  $V = V_0(1 + \alpha_V \Delta T)$ , где  $\alpha_V \cong 3\alpha$ .

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

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

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

### **Теплопроводность решетки (диэлектриков)**

Уравнение теплопроводности для потока тепловой энергии

$$dQ = -\chi \cdot \text{grad} T \cdot S \cdot dt.$$

Если поток тепла распространяется в одном направлении, то

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

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

Квантовая теория дает следующее выражение для коэффициента теплопроводности решетки:

$$\chi_{\text{реш}} = \frac{1}{3} C_{\text{реш}} \cdot v_{\Phi} \langle l_{\Phi} \rangle,$$

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

### Теплопроводность металлов

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

$$\chi_{Me} = \chi_{\text{реш}} + \chi_e,$$

где  $\chi_e$  – коэффициент теплопроводности электронов  $\chi_e = \frac{1}{3} C_e v_F \langle l_e \rangle$ ;  $C_e$  – теплоемкость *единицы объема* электронного газа,  $C_e \sim T$ ;  $v_F = \text{const}$  – скорость электронов на уровне Ферми;  $\langle l_e \rangle$  – длина свободного пробега электронов.

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

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

$$\frac{\chi}{\gamma} = LT,$$

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

$$\frac{\chi_e}{\gamma} = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{\kappa}{e} \right)^2 T,$$

где  $\frac{\pi^2}{3} \left( \frac{\kappa}{e} \right)^2 = 2,45 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт} \cdot \text{Ом}}{\text{К}^2}$ .

### 4.1.2 Примеры решения задач

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

Дано:  
 $V$   
 $\omega, \omega + d\omega$   
 $v$   


---

 $dN_\omega = ?$

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

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

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

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

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

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

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

Дано:  
 $n_0; v_{||} = v_{\perp} = v$   


---

 $\theta_D = ?$

*Решение.* Для решения задачи необходимо знать число нормальных колебаний, возникающих в системе. Для этого следует найти функцию рас-

предела нормальных колебаний  $g(\omega)$  по всем возможным частотам от 0 до  $\omega_{\max}$ , где  $\omega_{\max} = k\theta_D/\hbar$  – максимальная частота, соответствующая температуре Дебая.

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

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

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

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

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

где  $v$  – скорость распространения колебаний.

Функция распределения нормальных колебаний  $g(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{L}{\pi v}$ . В линейной цепочке атомов может возникнуть только  $N = n_0L$  нормальных колебаний, поэтому условие нормировки для функции  $g(\omega)$  имеет вид:

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

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

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

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

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

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

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

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 2N. \text{ Подставив в интеграл функцию } g(\omega) \text{ и пределы,}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Дано:

$$\theta_D = 330 \text{ К,}$$

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

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

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

*Решение.* Упругую волну в кристалле можно представить как совокупность квази-частиц-фононов, распространяющихся со скоростью  $v$ , равной скорости волны. Фонон имеет спин, равный нулю, поэтому подчиняется статистике Бозе – Эйнштейна. Фононы

могут рождаться и исчезать, т.е. фононный газ – система с переменным числом частиц, химический потенциал равновесного фононного газа равен нулю

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

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

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

Максимальная энергия фонона

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

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

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

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

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

Подставим численные значения:

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

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



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

Дано:

$$\theta_D = 330 \text{ К}$$

$$n_0 = 8,4 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$$

$$p_{\text{фон}} = ?$$

*Решение.* Газ фермионов и газ бозонов рассматриваем как идеальный газ с той лишь разницей, что вместо распределения Максвелла – Больцмана этот газ подчиняется соответственно статистикам Ферми-Дирака или Бозе-Эйнштейна. Поэтому для определения давления газа будем использовать основное уравнение МКТ

$p = \frac{2}{3} n_0 \langle \varepsilon \rangle$ , где  $n_0$  – концентрация частиц (электронов, фотонов или фононов);  $\langle \varepsilon \rangle$  – средняя энергия частицы.

Найдём давление фононного газа в меди. Учтём, что  $n_0 \langle \varepsilon \rangle = u$  – энергия единицы объёма фононного газа, отсюда  $u = \int_0^{v_{\text{max}}} h\nu dn$ . Найдём, учтя результат первой задачи:

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

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

причём  $v^3 = \frac{4\pi}{3n_0} \left( \frac{k\theta_D}{h} \right)^3$ . Подставив значение  $v^3$  и считая, что

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

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

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

$$p_{\text{фон}} = \frac{6n_0 k^4 T^4}{h^3 v_{\text{max}}^3} \int_v^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \text{ При } T = \theta_D \quad x_m = \frac{hv_{\text{max}}}{k\theta_D} = 1. \text{ В этом случае}$$

$$\int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \int_0^1 \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 0,225.$$

Давление фононного газа равно

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

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

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

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

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

*Решение.* Энергия нормального колебания решетки равна энергии осциллятора, имеющего массу, равную массе колеблющихся атомов, и колеблющегося с частотой, равной частоте нормального колебания:  $\varepsilon_\nu = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \nu \right)$ , где  $\nu$  – колебательное квантовое число осциллято-

ра. При  $\nu = 0$  имеют место нулевые колебания решетки,  $\varepsilon_0 = \hbar\omega/2$ .

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

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

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

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

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

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

Очевидно, объем кристалла  $V = 2N \cdot a^3 / \pi$ , где  $N$  – число атомов;  $a^3$  – объем одной кристаллической ячейки, тогда

$$E_0 = \frac{9}{8} \hbar \nu N \sqrt[3]{\frac{6\pi^3 N}{Na^3 2}} = \frac{9}{8} \frac{\hbar \nu N \pi}{a} \sqrt[3]{3} = \frac{9}{8} \frac{\hbar \nu N \pi \sqrt[3]{3}}{a}.$$

Для моля вещества  $N = N_A$ , тогда  $E_{0\mu} = \frac{9}{8} \frac{\pi \hbar N_A \nu}{a} \sqrt[3]{3}$ .

Подставим численные значения:

$$E_{0\mu} = \frac{9}{8} \cdot \frac{3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 6 \cdot 10^{23} \cdot 4 \cdot 10^3 \cdot \sqrt[3]{3}}{0,3 \cdot 10^{-9}} = 4 \cdot 10^3 \text{ Дж/моль.}$$

**Ответ:** 4 кДж/моль.

**Задача 6.** Вычислить среднюю длину свободного пробега фононов в кварце при некоторой температуре, если при этой температуре теплопроводность  $\chi = 13 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}$ , молярная теплоемкость  $c_{V\mu} = 44 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)}$ , средняя скорость звука  $v = 5 \text{ км/с}$ . Плотность кварца  $\rho = 2,65 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ .

ДАНО:

$$\chi = 13 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)},$$

$$c_{V\mu} = 44 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)},$$

$$v = 5 \cdot 10^3 \text{ м/с},$$

$$\rho = 2,65 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3,$$

$$\mu = 60 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$$

$$\langle \lambda_{\Phi} \rangle = ?$$

*Решение.* Кварц является диэлектриком, в нем имеет место фононный механизм теплопроводности. Теплопроводность определяется выражением

$$\chi = \frac{1}{3} \langle \lambda_{\Phi} \rangle v c_V,$$

где  $c_V$  – теплоемкость единицы объема.

Очевидно, теплоемкость единицы объема  $c_V$  связана с молярной теплоемкостью соотношением  $c_V = c_{V\mu} \frac{\rho}{\mu}$ ,

тогда теплопроводность  $\chi = \frac{1}{3} \langle \lambda_{\Phi} \rangle v \rho c_{V\mu} / \mu$ , и длина свободного пробега фонона равна  $\langle \lambda_{\Phi} \rangle = \frac{3\chi\mu}{v\rho c_{V\mu}}$ .

Подставим значения:

$$\langle \lambda_{\Phi} \rangle = \frac{3 \cdot 13 \cdot 60 \cdot 10^{-3}}{5 \cdot 10^3 \cdot 2,65 \cdot 10^3 \cdot 44} = 0,07 \cdot 10^{-9} = 7 \cdot 10^{-11} \text{ м.}$$

**Ответ:**  $\langle \lambda_{\Phi} \rangle = 7 \cdot 10^{-11} \text{ м.}$

### 4.1.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. Найти максимальную энергию фонона, который может возбуждаться в кристалле с температурой Дебая  $\theta_D = 300$  К. Фотон какой длины волны  $\lambda$  обладал бы такой же энергией?

2. Найти среднее число  $N_{\phi m}$  фононов максимальной частоты, возбуждаемых при  $T = 400$  К в кристалле с дебаевской температурой  $\theta_D = 200$  К.

3. Найти среднее значение частоты нормальных колебаний для трехмерного кристалла, состоящего из атомов одного сорта. Равновесные положения атомов находятся в вершинах прямоугольных ячеек. Концентрация атомов  $n_0 = 1,25 \cdot 10^{29} \text{ м}^{-3}$ . Скорость продольных и поперечных волн в кристалле одинакова и равна 3000 м/с.

4. Вычислить энергию нулевых колебаний, приходящуюся на 1 г меди, если дебаевская температура  $\theta_D = 330$  К.

5. При давлении  $p = 1013$  ГПа аргон затвердевает при температуре 84 К. Температура Дебая  $\theta_D = 92$  К. При  $T_1 = 4$  К молярная теплоемкость аргона  $c_{\mu 1} = 0,174$  Дж/(моль·К). Найти молярную теплоемкость аргона при  $T_2 = 2$  К.

6. Определить энергию нулевых колебаний охлажденного до затвердевания моля аргона. Температура Дебая  $\theta_D = 92$  К.

7. Для хлорида калия температура Дебая  $\theta_{D1} = 230$  К, а для хлорида натрия  $\theta_{D2} = 280$  К. Во сколько раз удельная теплоемкость KCl больше удельной теплоемкости NaCl при  $T = 40$  К?

8. Найти теплоемкость электронов проводимости для единицы объема меди при температуре 200 К. Значение энергии Ферми для меди  $E_F = 7$  эВ. Концентрация электронов равна числу атомов в единице объема.

9. Найти отношение средней длины свободного пробега фононов к параметру решетки  $d$  при комнатной температуре в кристалле NaCl, если теплопроводность при этой температуре  $\chi = 71$  Вт/(м·К). Плотность кристалла  $\rho = 2,17 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>. Скорость звука  $v = 5$  км/с.

10. Определить коэффициент гармоничности  $\beta$  в уравнении колебаний частиц твердого тела, если равновесное расстояние между частицами  $r_0 = 0,3$  нм, модуль Юнга  $E = 200$  ГПа.

## Тестовые задания

1. Какие частицы (квазичастицы) обуславливают перенос тепла в диэлектриках при комнатной температуре?

Варианты ответов:

- 1) электроны;
- 2) дырки;
- 3) экситоны;
- 4) фононы;
- 5) куперовские пары.

2. Что такое температура Дебая?

Варианты ответов:

1) Это температура вырождения. Ниже которой электронный газ ведет себя, как вырожденный.

2) Это температура, при которой происходит переход в сверхпроводящее состояние.

3) Это температура, при которой возбуждаются все моды (частоты) колебаний в кристаллической решетке данного твердого тела.

4) Это температура фазового перехода.

3. Выберите формулу, которая описывает среднюю энергию фонона ( $\hbar$  – постоянная Планка;  $\omega$  – круговая частота;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $E_F$  – энергия Ферми).

Варианты ответов:

- 1)  $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{\hbar\omega}{\ell^{kT} + 1}$ .
- 2)  $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{\hbar\omega}{\ell^{kT} - 1}$ .
- 3)  $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{3}{5} E_F$ .
- 4)  $\langle E_{\Phi} \rangle = \frac{1}{\ell^{kT} + 1}$ .

4. Теплоемкость моля вещества  $C_{\mu}$  при температуре много меньше характеристической температуры Дебая ( $T \ll \Theta$ ) можно рассчитать с помощью следующего выражения ( $R$  – универсальная газовая постоянная;  $i$  – число степеней свободы):

Варианты ответов:

- 1)  $C_{\mu} = 3R$ ;
- 2)  $C_{\mu} = 2,87R$ ;
- 3)  $C_{\mu} = \frac{12\pi^4}{5} R \left( \frac{T}{\Theta} \right)^3$ ;
- 4)  $C_{\mu} = \frac{i}{2} R$ .

5. Продолжите фразу: закон Видемана-Франца устанавливает, что ...

Варианты ответов:

- 1) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности пропорционально абсолютной температуре;
- 2) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности пропорционально квадрату абсолютной температуры;
- 3) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности обратно пропорционально абсолютной температуре;
- 4) отношение теплопроводности металлов к их электропроводности пропорционально кубу абсолютной температуры.

#### 4.1.4 Задачи для самостоятельного решения

1. Определить температуру Дебая для двумерного кристалла, состоящего из атомов одного сорта. Атомы могут колебаться в плоскости, на которой они размещаются. Равновесные положения атомов находятся в вершинах прямоугольных кристаллических ячеек. Концентрация атомов  $n_0 = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-2}$ , скорость поперечных и продольных волн в кристалле одинакова и равна  $v = 3000 \text{ м/с}$ .

2. Как изменится расстояние между энергетическими уровнями фонона в кристалле при увеличении объёма кристалла в 2 раза? Концентрация атомов неизменна.

3. Оценить скорость распространения акустических колебаний в алюминии, если дебаевская температура  $\theta_D = 396 \text{ К}$ .

4. Найти молярную энергию нулевых колебаний кристалла, для которого температура Дебая  $\theta_D = 320 \text{ К}$ .

5. Найти максимальную частоту  $\omega_{\max}$  собственных колебаний в кристалле железа, если при температуре  $T = 20 \text{ К}$  его удельная теплоемкость  $c = 2,7 \text{ мДж/(г} \cdot \text{К)}$ .

6. При нагревании кристалла меди массы  $m = 25 \text{ г}$  от  $T_1 = 10 \text{ К}$  до  $T_2 = 20 \text{ К}$  ему было сообщено количество тепла  $Q = 0,8 \text{ Дж}$ . Найти дебаевскую температуру, если  $\theta_D \gg T_1$  и  $\theta_D \gg T_2$ .

7. Определить молярную теплоемкость свинца при  $T = 20 \text{ К}$ . Температура Дебая  $\theta_D = 90 \text{ К}$ .

8. Найти теплоемкость электронов проводимости для натрия при  $2 \text{ К}$  и  $1000 \text{ К}$ . Концентрация свободных электронов  $n_0 = 2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ . Энергия Ферми  $E_F = 7 \text{ эВ}$ .

9. Найти коэффициент объемного расширения  $\beta_0$  для анизотропного кристалла, коэффициенты линейного расширения которого составляют  $\alpha_1 = 1,25 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ ,  $\alpha_2 = 1,10 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ ,  $\alpha_3 = 1,15 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ .

10. Вычислить максимальную силу, возвращающую атом твердого тела в положение равновесия, если коэффициент гармоничности  $\beta = 50 \text{ Н/м}$ , коэффициент ангармоничности  $\tau = 500 \text{ ГПа}$ .

### Тестовые задания

1. Что такое фонон?

Варианты ответов:

1) Элементарная частица, квант электромагнитного излучения.  
2) Квазичастица, квант колебательного движения атомов кристалла.

3) Квазичастица, носитель положительного заряда, равного элементарному заряду.

4) Атомные электроны, которые могут свободно перемещаться по проводнику.

5) Квазичастица, описывающая связанное состояние двух электронов вблизи поверхности Ферми, обусловленное межэлектронным притяжением.

2. Что называется характеристической температурой Эйнштейна  $\theta_E$ ?

Варианты ответов:

1) Это температура вырождения. Ниже которой электронный газ ведет себя, как вырожденный.

2) Это температура, при которой происходит переход в сверхпроводящее состояние.

3) Это температура, при которой возбуждаются все моды (частоты) колебаний в кристаллической решетке данного твердого тела.

4) Температура, при которой начинается быстрый спад теплоемкости;

3. Выберите формулу, которая описывает характеристическую температуру Дебая ( $E_F$  – энергия Ферми;  $E_{\text{средн}}$  – средняя энергия электронов в кристалле;  $\hbar$  – постоянная Планка;  $\omega_{\text{макс}}$  и  $\omega_{\text{средн}}$  – максимальная и средняя частоты нормальных колебаний решетки).

Варианты ответов:

$$1) \Theta = \frac{E_F}{k}; \quad 2) \Theta = \frac{\hbar\omega_{\text{средн}}}{k};$$
$$3) \Theta = \frac{\hbar\omega_{\text{макс}}}{k}; \quad 4) \Theta = \frac{E_{\text{средн}}}{k}.$$

4. Теплоемкость моля вещества  $C_\mu$  при температуре больше характеристической температуры Дебая ( $T > \Theta$ ) можно рассчитать с помощью следующего выражения ( $R$  – универсальная газовая постоянная;  $i$  – число степеней свободы):

Варианты ответов:

$$1) C_\mu = 3R; \quad 2) C_\mu = 2,87R;$$
$$3) C_\mu = \frac{12\pi^4}{5} R \left( \frac{T}{\Theta} \right)^3; \quad 4) C_\mu = \frac{i}{2} R.$$

5. Характеристическая температура Дебая для первого кристалла 150 К, а для второго кристалла – 300 К. Чему равно отношение молярной теплоемкости первого кристалла к молярной теплоемкости второго кристалла при температуре 15 К?

Варианты ответов:

$$1) 0,125; \quad 2) 0,25; \quad 3) 0,5; \quad 4) 1;$$
$$5) 8; \quad 6) 4; \quad 7) 2.$$

#### 4.1.5 Вопросы для самоконтроля

1. Что называется нормальными колебаниями?
2. Чем определяется число нормальных колебаний?
3. Чем определяется энергия нормальных колебаний?
4. Что называется нулевой энергией нормальных колебаний?
5. Что называется фононами?
6. Какой статистике подчиняются фононы?
7. С какой скоростью распространяется в кристалле фонон?
8. В чём заключается суть теории теплоёмкости Эйнштейна?
9. В чём заключается суть теории теплоёмкости Дебая?
10. Что называется характеристической температурой Эйнштейна?
11. Что называется характеристической температурой Дебая?
12. Что называется спектральной плотностью распределения нормальных колебаний?



13. Что называется характеристической частотой Дебая?
14. Чем определяется энергия кристаллической решётки?
15. Сформулируйте закон Дюлонга и Пти. Для каких температур он справедлив?
16. Сформулируйте закон кубов Дебая. Для каких температур он справедлив?
17. Чем определяется теплоёмкость кристаллической решётки (диэлектриков)?
18. Чем определяется теплоёмкость металлов при низких и высоких температурах?
19. Чем объясняется тепловое расширение твёрдых тел?
20. Чем определяется теплопроводность кристаллической решётки (диэлектриков)?
21. Чем определяется теплопроводность металлов при низких и высоких температурах?
22. О чём гласит закон Видемана – Франца?

## **4.2 Электропроводность твердых тел**

### **4.2.1 Краткая теория**

С точки зрения зонной теории твердого тела энергетический спектр кристалла можно представить как чередование зон – разрешенных, включающих значения энергии, которые электрон может принимать в данном кристалле, и запрещенных, содержащих совокупность значений энергии, которые электрон принимать не может. На энергетической диаграмме кристалла изображают последнюю внешнюю разрешенную зону, заполненную электронами (ее называют валентной зоной), ближайшую к ней запрещенную зону и следующую за ней свободную разрешенную зону, называемую зоной проводимости.

По характеру заполнения энергетических зон все кристаллы делятся на металлы, диэлектрики и полупроводники.

*В металлах* валентная зона заполнена электронами либо частично, либо целиком, но при этом перекрывается со следующей разрешенной зоной. Заполненные состояния от незаполненных отделяются уровнем Ферми. Таким образом, уровень Ферми в металлах расположен в разрешенной зоне.

Электронный газ в металле является вырожденным, в этом случае концентрация электронов от температуры практически не зависит, и температурная зависимость электропроводности целиком определяется температурной зависимостью подвижности. В области высоких температур в металлах, так же как и в полупроводниках, доминирует рассеяние электронов на фононах, а подвижность обратно пропорциональна температуре. Тогда удельное сопротивление линейно растет с температурой. При низких температурах концентрация фононов становится малой, подвижность определяется рассеянием электронов на примесях и не зависит от температуры. Сопротивление остается постоянным (рисунок 4.2).

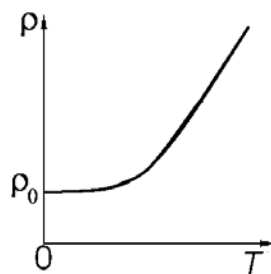


Рисунок 4.2 – Зависимость удельного сопротивления металлов от температуры

Электрические свойства описывает элементарная классическая теория металлов, разработанная Друде и Лоренцем, в соответствии с которой средние скорости электронов равны скорости их теплового движения  $v$ . Проводимость металла  $\sigma = \frac{ne^2 \langle \lambda \rangle}{2m}$ , где  $\langle \lambda \rangle$  – длина среднего свободного пробега электрона. Время релаксации  $\tau = \langle \lambda \rangle / v$ .

К *полупроводникам* относят кристаллы, у которых при  $T > 0$  К валентная зона полностью заполнена электронами, а зона проводимости полностью свободна. Ширина запрещенной зоны составляет не более 3 эВ. Электронный газ в полупроводниках можно считать невырожденным.

В чистом полупроводнике, не содержащем примесей, осуществляется электронная и дырочная электропроводность. При этом следует напомнить, что за положительное направление тока принимают направление движения положительных носителей, и движение под действием поля дырок по полю и электронов – против поля создает ток одного направления. В собственном полупроводнике при разры-

ве ковалентной связи появляется свободный электрон и вакантное место в ковалентной связи – дырка. Это равнозначно переходу электрона из валентной зоны в зону проводимости. Под действием электрического поля электрон и дырка перемещаются в кристалле. На рисунке 4.3 представлена энергетическая диаграмма, соответствующая такому переходу, здесь  $E_V$  – энергия, соответствующая «потолку» валентной зоны,  $E_C$  – энергия «дна» валентной зоны,  $E_F$  – энергия Ферми.

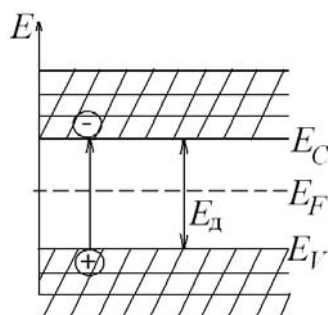


Рисунок 4.3 – Энергетическая диаграмма, соответствующая собственному полупроводнику

Полупроводник, имеющий примеси, называют **примесным**, а его электропроводность, обусловленную наличием примеси, – примесной проводимостью. Дефекты в кристалле создают локальные энергетические уровни в запрещенной зоне собственного полупроводника.

Образование локальных энергетических уровней в случае примесных атомов замещения представлено на рисунке 4.4,а. В электронном полупроводнике (*n*-типа) примесь отдает электроны и называется **донорной**. Энергия  $\Delta E_d$ , необходимая для перехода электрона с уровня примеси в зону проводимости, меньше, чем энергия перехода электрона из валентной зоны  $E_g$  (рисунок 4.4,б). Благодаря этому при малых температурах концентрация электронов примеси оказывается много больше концентрации собственных носителей. В силу этого доминирующую роль в проводимости будут играть электроны, поэтому их называют основными носителями заряда, а дырки – неосновными носителями заряда.

При ионизации всех атомов примеси концентрация электронов в зоне проводимости равна концентрации атомов примеси:  $n_e = n_d$ .

При  $T = T_S$  уровень Ферми  $E_F$  лежит ниже  $E_d$ , поскольку  $E_F = E_d$  при 50% ионизации атомов примеси.

При высоких температурах происходит резкое увеличение концентрации электронов в зоне проводимости, и такое же увеличение концентрации дырок в валентной зоне; уровень Ферми опускается вниз. При  $T = T_i$   $n_e \cong n_p$ , где  $n_e = n_d + n_i$ ,  $E_F$  находится вблизи середины запрещенной зоны и полупроводник становится «почти собственным», его называют **компенсированным**.

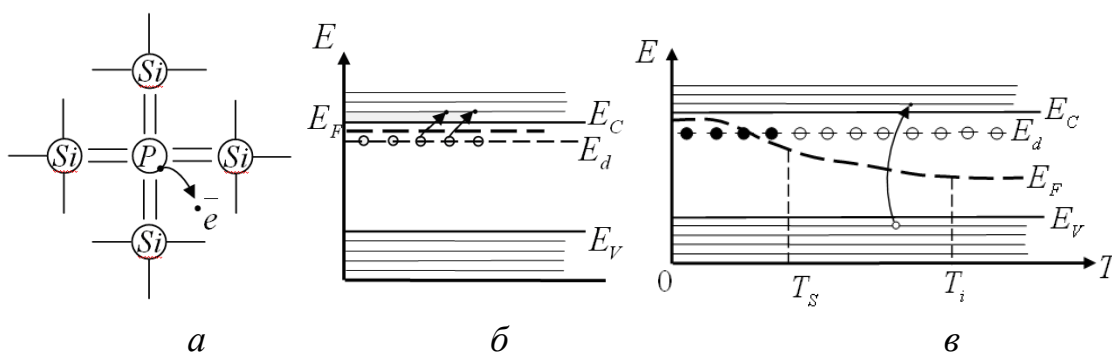


Рисунок 4.4 – Образование локальных энергетических уровней  $E_d$  в случае донорных примесных атомов (а, б); зависимость положения  $E_F$  от  $T$  в полупроводнике n-типа (в)

В дырочном полупроводнике (рисунок 4.5,а) осуществляется переход электрона из заполненной связи в вакантную. Это переход электрона из заполненной валентной зоны на локальный уровень примеси (рисунок 4.5,б). Он освобождает один из уровней в верхней части валентной зоны и создает в валентной зоне дырку.

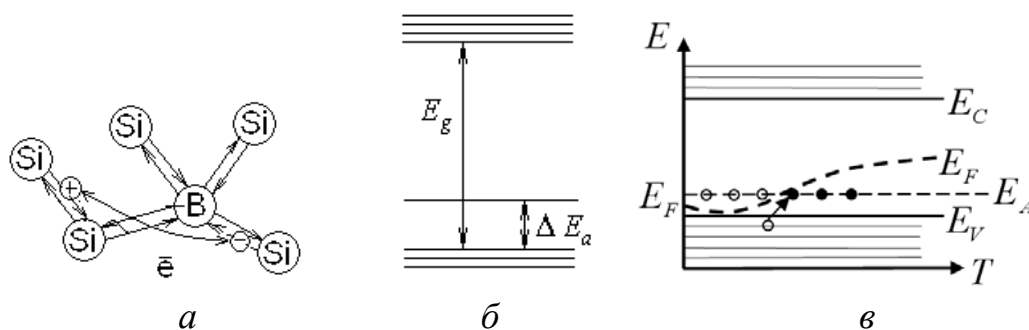


Рисунок 4.5 – Образование локальных энергетических уровней  $E_a$  в случае акцепторных примесных атомов (а, б); зависимость положения  $E_F$  от  $T$  в полупроводнике p-типа (в)

Переход электронов из валентной зоны на уровни примеси требует меньшей энергии, чем переход их в зону проводимости кристалла ( $\Delta E_a < E_g$ ). Атомы примеси такого рода называют **акцепторными**.

Процессы, протекающие в дырочном полупроводнике при увеличении температуры, полностью аналогичны процессам в полупроводнике  $n$ -типа: ход  $E_F(T)$  такой же.

Плотность тока для полупроводника  $\vec{j} = -en\vec{v}_D$ , где  $\vec{v}_D$  – дрейфовая скорость электрона.

Внешнее электрическое поле напряженностью  $\vec{E}$  сообщает электрону ускорение  $\vec{a} = \frac{e\vec{E}}{m}$ , за время свободного пробега  $\tau$  электрон приобретает дрейфовую скорость  $\vec{v}_D = \vec{a}\tau = \frac{e\tau}{m}\vec{E}$  и пройдет путь

$x = \frac{e|\vec{E}|}{2m}\tau^2$ . Параметр, связывающий дрейфовую скорость носителей заряда с напряженностью электрического поля, называют подвижностью носителей  $u = v_D/|\vec{E}|$ . Тогда  $\vec{v}_D = u\vec{E}$ , и  $u = e\tau/m$  – подвижность численно равна скорости дрейфа в электрическом поле единичной напряженности.

Плотность тока  $\vec{j} = -en\vec{v} = enu_n\vec{E}$ . По закону Ома  $\vec{j} = \sigma\vec{E}$ , тогда удельная проводимость равна  $\sigma = \frac{j}{|\vec{E}|} = enu_n = \frac{e^2n\tau}{m}$ .

Зависимость проводимости полупроводника от температуры определяется температурной зависимостью концентрации и подвижности носителей в полупроводнике. В примесных полупроводниках носители заряда рассеиваются не только на фононах (тепловое рассеяние), но и на ионизированных атомах примеси. Расчеты показывают, что подвижность, обусловленная рассеянием на ионизированной примеси, в случае невырожденного электронного газа пропорциональна  $T^{3/2}$ , а в случае вырожденного не зависит от температуры. Этот механизм рассеяния играет решающую роль при низких температурах, когда концентрация фононов мала. При высоких температурах доминирует рассеяние на фононах – тепловое рас-

сеяние. Зависимость подвижности от температуры для примесного невырожденного полупроводника, учитывающая как рассеяние на ионах, так и рассеяние на фононах, представлена на рисунке 4.6. При наличии обоих механизмов рассеяния результирующая подвижность  $u$  определяется выражением

$$\frac{1}{u} = \frac{1}{u_{\text{пр}}} + \frac{1}{u_{\text{T}}},$$

где  $u_{\text{пр}}$  – подвижность носителей заряда при рассеянии только на примесях;  $u_{\text{T}}$  – только на нормальных тепловых колебаниях решетки. При этом  $u_{\text{пр}} \sim T^{3/2}$ ;  $u_{\text{T}} \sim T^{-3/2}$ . Поэтому  $1/u = aT^{-3/2} + bT^{3/2}$ .

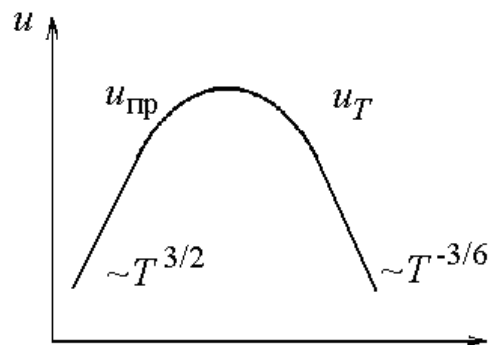


Рисунок 4.6 – Зависимость подвижности от температуры для примесного невырожденного полупроводника

При низких температурах преобладает первое слагаемое, при высоких – второе (рисунок 4.6).

Положение максимума на кривой зависит от концентрации дефектов в решетке – с увеличением концентрации дефектов максимум смещается в сторону более высоких температур.

На основании изложенного можно сделать вывод о том, какой должна быть температурная зависимость проводимости примесного полупроводника. В интервале температур, где концентрация носителей, согласно классическому распределению Максвелла-Больцмана, экспоненциально зависит от температуры,  $\sigma(T)$  также практически является экспоненциальной функцией, а в области истощения примеси ход кривой  $\sigma(T)$  определяется подвижностью.

Таким образом, температурный ход проводимости полупроводника определяются в основном экспоненциальным множителем, поэтому удельная проводимость полупроводника равна:

$$\sigma = \sigma_{\text{соб}} + \sigma_{\text{пр}} = Ce^{-E_g/2kT} + C'e^{-\Delta E_{\text{пр}}/kT},$$

где  $\sigma_{\text{соб}}$ ,  $\sigma_{\text{пр}}$  – собственная и примесная удельные проводимости;  $E_g$  – ширина запрещенной зоны;  $\Delta E_{\text{пр}}$  – энергия активации, необходимая для создания примесного носителя заряда;  $C$ ,  $C'$  – коэффициенты, зависящие от природы полупроводника.

При низкой температуре можно пренебречь первым слагаемым, и  $\sigma = \sigma_{\text{пр}} = C'e^{-\frac{\Delta E_{\text{пр}}}{kT}}$ , при высоких температурах можно пренебречь вторым слагаемым, поэтому  $\sigma = \sigma_{\text{соб}} = Ce^{-\frac{E_g}{2kT}}$ .

Температурную зависимость проводимости полупроводника удобно анализировать с помощью графика, построенного в координатной плоскости с осями  $\ln \sigma$  и  $1/T$ . График имеет вид ломаной линии (рисунок 4.7).

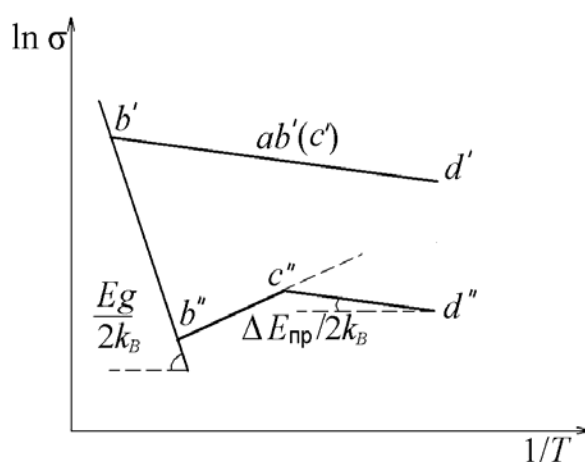


Рисунок 4.7 – График температурной зависимости проводимости полупроводника в координатах  $\ln \sigma$  и  $1/T$

В области низких температур имеет место примесная проводимость (участки  $d'' - c''$ ), которая растет с ростом температуры, т.к. растет концентрация примесных носителей заряда. Участки  $c'' - b''$  соответствуют ситуации, когда атомы примеси ионизированы, а собственная проводимость ещё мала. За счет уменьшения подвижности носителей с ростом температуры проводимость полупроводника несколько уменьшается. С дальнейшим ростом температуры начинает преобладать собственная проводимость (участок  $b'' - b'$ ). С ростом концентрации примесей участки ломаной линии  $d'' - c'' - b''$  смеща-

ются вверх, и температура перехода от примесной проводимости к собственной смещается в сторону более высоких температур. При больших концентрациях примеси атомы примеси остаются неполностью ионизированы вплоть до температуры, при которой начинается собственная проводимость (участок  $b' - d'$ ).

График зависимости  $\ln \sigma = f\left(\frac{1}{T}\right)$  позволяет определить ширину запрещенной зоны  $E_g$  и энергию ионизации примесных носителей  $\Delta E_{\text{пр}}$ .

**Эффект Холла.** В металлах и полупроводниках наблюдается эффект Холла. Рассмотрим образец прямоугольной формы, по которому течет ток с плотностью  $\vec{j}$ . Образец помещен в магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ , перпендикулярной вектору  $\vec{j}$  (рисунок 4.8). Под действием электрического поля  $\vec{E}$  электроны в проводнике приобретают дрейфовую скорость  $\vec{v}_D = u\vec{E}$ . На частицу, движущуюся с этой скоростью в магнитном поле, действует сила Лоренца  $\vec{F}_L = -e[\vec{v}_D, \vec{B}]$ , направленная перпендикулярно векторам  $\vec{E}$  и  $\vec{B}$ .

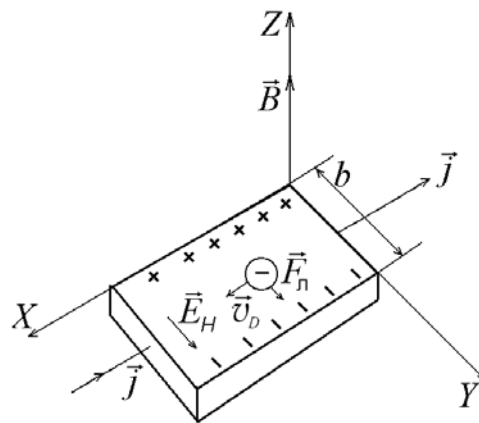


Рисунок 4.8 – Механизм возникновения эффекта Холла

Под действием сил  $-e\vec{E}$  и  $\vec{F}_L$  электрон перемещается вдоль образца, одновременно вращаясь (под действием магнитного поля). Траекторией такого движения является циклоида. Магнитное поле, при котором радиус кривизны траектории много больше длины свободного пробега электрона, называют слабым. Под действием силы Лоренца электроны отклоняются к боковой поверхности образца, и на ней создается избыток отрицательного заряда. На противополож-



ной стороне возникает недостаток отрицательного заряда (избыток положительного). Разделение зарядов происходит до тех пор, пока сила, действующая на электроны со стороны возникшего электрического поля  $\vec{E}_H$ , направленного от одной боковой поверхности к другой, не скомпенсирует силу Лоренца. Это поле  $\vec{E}_H$  называют полем Холла, а само явление возникновения в образце с текущим по нему током поперечного электрического поля под действием магнитного поля – **эффектом Холла**.

Разделение зарядов прекратится при условии:  $ev_D B - eE_H = 0$ . Тогда разность потенциалов  $U_H$  между боковыми гранями, называемая ЭДС Холла или холловской разностью потенциалов, равна

$$U_H = E_H b = v_D B b,$$

где  $b$  – ширина образца. Плотность тока  $j = |e| n v_D$ , тогда  $U_H = \frac{1}{n|e|} j B b = R_H j B b$ ,  $R_H = \frac{1}{n|e|}$  – постоянная Холла. По постоянной Холла можно определить тип проводимости полупроводника и концентрацию носителей заряда.

**Внутренний фотоэффект.** Изменение электрического сопротивления полупроводника, обусловленное непосредственным действием излучения, называется *фоторезистивным эффектом* или *внутренним фотоэффектом*. Этот эффект можно описать величиной световой проводимости:

$$\sigma_{св} = e u_n \cdot \Delta n + e u_p \cdot \Delta p,$$

где  $\Delta n$  и  $\Delta p$  – избыточная концентрация электронов и дырок, создаваемая светом.

Красная граница внутреннего фотоэффекта определяется следующими выражениями:  $\lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E}$  – для собственного полупроводника;  $\lambda_{01} = \frac{hc}{\Delta E_d}$  – для донорного и  $\lambda_{02} = \frac{hc}{\Delta E_a}$  – для акцепторного полупроводников. Для собственных полупроводников красная граница, как правило, находится в видимой области спектра. Для примесных – в инфракрасной области.

## 4.2.2 Примеры решения задач

**Задача 1.** Концентрация свободных электронов железа  $n = 8,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ , его удельное сопротивление при  $20^\circ \text{C}$   $\rho = 9,71 \cdot 10^{-8} \text{ Ом} \cdot \text{м}$ . Найти при этой температуре время релаксации, среднюю длину свободного пробега электронов и их подвижность.

Дано:

$$n = 8,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$$

$$T = 293 \text{ К}$$

$$\rho = 9,71 \cdot 10^{-8} \text{ Ом} \cdot \text{м}$$

$$\langle \tau \rangle = ? \quad \langle \lambda \rangle = ?$$

$$u_e = ?$$

*Решение.* В задаче рассматривается механизм электропроводности в металлическом проводнике. В этом случае скорости всех электронов проводимости одинаковы и равны скорости их теплового движения  $v$ . Проводимость металла  $\sigma = \frac{ne^2 \langle \lambda \rangle}{2mv}$ , где  $\langle \lambda \rangle$  – длина

среднего свободного пробега электрона. Время релаксации, т.е. время, за которое электрон проходит путь, равный длине свободного пробега,  $\tau = \langle \lambda \rangle / v$ . Подвижность электронов  $u_e = v_D / |\vec{E}|$ .

Удельное сопротивление металла – это величина, обратная проводимости:  $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{2mv}{ne^2 \langle \lambda \rangle}$ , тогда длина свободного пробега электрона

$\langle \lambda \rangle = \frac{2mv}{ne^2 \rho}$ . С учетом выражения для средней скорости теплового движения электронов  $\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$  получаем  $\langle \lambda \rangle = \frac{2m}{ne^2 \rho} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$ .

$$\langle \lambda \rangle = \frac{2m}{ne^2 \rho} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$$

Подставим значения:

$$\langle \lambda \rangle = \frac{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}{8,5 \cdot 10^{28} \cdot 9,71 \cdot 10^{-8} \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}} \sqrt{\frac{8 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 293}{3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}} = 0,86 \cdot 10^{-9} \text{ м.}$$

Время релаксации  $\tau = \lambda / v = 2m / ne^2 \rho$ .

$$\text{Подставим значения: } \tau = \frac{0,86 \cdot 10^{-9}}{1,06 \cdot 10^5} = 0,81 \cdot 10^{-14} \text{ с.}$$

Найдем подвижность электронов. Средняя скорость упорядоченного движения электронов равна  $\langle v_D \rangle = \frac{E \langle \lambda \rangle}{2mv}$ , тогда подвижность

$$u_e = \frac{eE \langle \lambda \rangle}{2mvE} = \frac{e \langle \lambda \rangle}{2mv}.$$

Подставим значения:

$$u_e = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 0,86 \cdot 10^{-9}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,06 \cdot 10^5} = 7 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).$$

**Ответ:**  $\langle \lambda \rangle = 0,86 \cdot 10^{-9} \text{ м}$ ,  $\tau = 0,81 \cdot 10^{-14} \text{ с}$ ,  $u_e = 7 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ .

**Задача 2.** Во сколько раз изменится электропроводность чистого германия при повышении температуры от  $-23 \text{ }^\circ\text{C}$  до  $+27 \text{ }^\circ\text{C}$ ? Ширина запрещенной зоны для германия  $E_g = 0,74 \text{ эВ}$ .

Дано:

$$T_1 = 250 \text{ К}$$

$$T_2 = 300 \text{ К}$$

$$E_g = 0,74 \text{ эВ}$$

$$\eta = \sigma_2 / \sigma_1 = ?$$

*Решение.* В задаче рассматривается чистый германий, т.е. собственный полупроводник. Его электропроводность описывается выражением

$$\sigma = \sigma_0 \exp(-E_g / kT), \quad (1)$$

где  $E_g$  – ширина запрещенной зоны.

Записав выражение (1) для двух температур, получаем систему уравнений:

$$\sigma_1 = \sigma_0 \exp(-E_g / kT_1),$$

$$\sigma_2 = \sigma_0 \exp(-E_g / kT_2).$$

Разделим второе уравнение на первое, получаем:

$$\eta = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} = \exp \frac{E_g}{k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right).$$

Подставим значения:

$$\eta = \exp \frac{0,74 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \left( \frac{1}{250} - \frac{1}{300} \right) = e^{5,7} = 287,6 \text{ раз.}$$

**Ответ:** Увеличится в 287,6 раз.

**Задача 3.** Найти электропроводность германия, если в нем содержится индия в концентрации  $n_1 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$  и сурьмы  $n_2 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$ . Подвижность электронов в германии  $u_n = 0,38 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ , дырок  $u_p = 0,18 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ .

Дано:

$$n_1 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$$

$$n_2 = 10^{21} \text{ м}^{-3}$$

$$u_n = 0,38 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$$

$$u_p = 0,18 \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$$

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$


---


$$\sigma = ?$$

*Решение.* В собственный полупроводник – германий, внедрено два вида примеси:  
– трехвалентный индий In, который является акцептором и обеспечивает проводимость  $p$ -типа;  
– пятивалентная сурьма Sb, которая является донором и обеспечивает проводимость  $n$ -типа.

Каждый атом индия создает одну дырку, участвующую в проводимости, поэтому концентрация дырок  $n_p = n_1$ . Каждый атом сурьмы отдает один электрон, который участвует в проводимости, поэтому концентрация электронов  $n_n = n_2$ .

В приведенных рассуждениях можно считать, что вся примесь полностью ионизирована. Электропроводность примесного полупроводника равна сумме электропроводностей, создаваемых дырками и электронами.

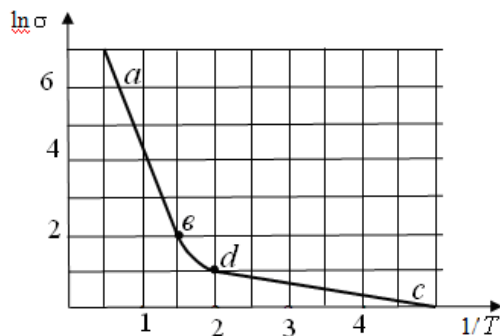
Электропроводность равна  $\sigma = \sigma_p + \sigma_n = en_p u_p + en_n u_n$ .

Подставим численные значения:

$$\sigma = 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot (10^{22} \cdot 0,18 + 10^{21} \cdot 0,38) = 349 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1} \approx 350 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}.$$

**Ответ:**  $350 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ .

**Задача 4.** На рисунке показан график зависимости логарифма проводимости от величины, обратной температуре  $T$  (кК), для некоторого полупроводника  $n$ -типа. Найти с помощью этого графика ширину запрещенной зоны и энергию активации донорных уровней.



Дано:

$$\ln \sigma = f(1/T)$$


---


$$E_g = ?$$

$$\Delta E_a = ?$$

*Решение.* Для решения задачи следует воспользоваться температурной зависимостью проводимости собственного и примесного полупроводников.

Собственная проводимость полупроводника возникает при высоких температурах (на рисунке – кривая, соответствующая значениям  $1/T < 1,5 \text{ кК}^{-1}$ ) и определяется выражением  $\sigma = \sigma_0 \exp(-E_g/kT)$ , где  $E_g$  – ширина запрещенной зоны. Прологарифмировав это выражение, получим

$$\ln \frac{\sigma_0}{\sigma} = \frac{E_g}{2kT} \quad \text{и} \quad \ln \sigma_0 - \ln \sigma = \frac{E_g}{2kT}.$$

На прямой  $ab$  (рисунок), описывающей собственную проводимость, возьмём две точки, соответствующие значениям  $\sigma_1, 1/T_1$  и  $\sigma_2, 1/T_2$ . Находим  $\ln \sigma_1 = 7; 1/T_1 = 0,5 \text{ кК}^{-1}$  и  $\ln \sigma_2 = 2, 1/T_2 = 1,5 \text{ кК}^{-1}$ .

Получаем систему уравнений: 
$$\begin{cases} \ln \sigma_0 - \ln \sigma_1 = \frac{E_g}{2k} \frac{1}{T_1} \\ \ln \sigma_0 - \ln \sigma_2 = \frac{E_g}{2k} \frac{1}{T_2} \end{cases}.$$

Вычтем из первого уравнения второе:

$$\ln \sigma_2 - \ln \sigma_1 = \frac{E_g}{2k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right),$$

ширина запрещенной зоны 
$$E_g = 2k \frac{\ln \sigma_1 - \ln \sigma_2}{1/T_2 - 1/T_1}.$$

Подставим численные значения:

$$E_g = 2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 5 \cdot 10^3 = 1,38 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 0,86 \text{ эВ}.$$

Проведя аналогичный расчёт для прямой  $cd$  (рисунок), соответствующей примесной проводимости (при  $1/T > 2 \text{ кК}^{-1}$ ), и учитывая, что проводимость примесного полупроводника определяется выражением  $\sigma = \sigma_0 \exp(-\Delta E_a/kT)$ , где  $\Delta E_a$  – энергия активации, получаем  $\ln \sigma_1 = 1$  при  $1/T_1 = 2 \text{ кК}^{-1}$  и  $\ln \sigma_2 = 0,5$  при  $1/T_2 = 3,5 \text{ кК}^{-1}$ . Энергия активации равна

$$\Delta E_a = 2k \frac{\ln \sigma_1 - \ln \sigma_2}{1/T_1 - 1/T_2}.$$

Подставив значения, имеем

$$\Delta E_a = 2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot \frac{0,5 \cdot 10^3}{3} = 0,46 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} = 0,03 \text{ эВ}.$$

**Ответ:**  $E_g = 0,86 \text{ эВ}; \Delta E_a = 0,03 \text{ эВ}.$

**Задача 5.** При измерении эффекта Холла пластину из полупроводника  $p$ -типа ширины  $h = 10 \text{ мм}$  и длины  $l = 50 \text{ мм}$  поместили в магнитное поле с индукцией  $B = 0,5 \text{ Тл}$ . К концам пластины прило-

жили разность потенциалов  $U = 10$  В. При этом холловская разность потенциалов  $U_H = 50$  мВ и удельное сопротивление  $\rho = 2,5$  Ом·см. Найти концентрацию дырок и их подвижность.

Дано:

$$h = 0,01 \text{ м}$$

$$l = 0,05 \text{ м}$$

$$B = 0,5 \text{ Тл}$$

$$U = 10 \text{ В}$$

$$U_H = 0,05 \text{ В}$$

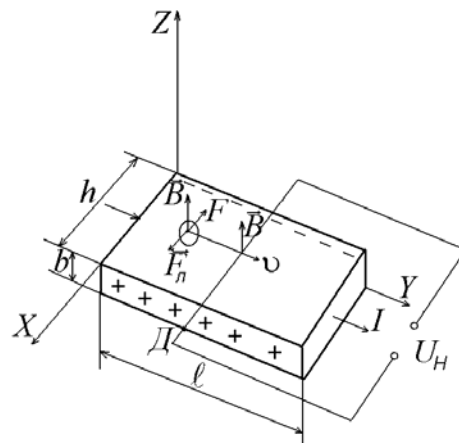
$$\rho = 2,5 \cdot 10^{-2} \text{ Ом} \cdot \text{м}$$

$$n_p = ? \quad u_p = ?$$

*Решение.* В задаче рассматривается эффект Холла в полупроводнике  $p$ -типа (рисунок).

Эффект Холла состоит в том, что при пропускании тока вдоль проводящей пластины, помещённой перпендикулярно линиям внешнего магнитного поля, возникает поперечная разность потенциалов вследствие взаимодействия носителей заряда с магнитным полем. На рисунке в отсутствие магнитного поля разность потенциалов между точками  $C$  и  $D$ , лежащими на одной из эквипотенциальных плоскостей, равна нулю.

Если образец поместить в магнитное поле с индукцией  $\vec{B}$ , перпендикулярной направлению тока и плоскости образца, то между точками  $C$  и  $D$  возникает разность потенциалов  $U_H$ , называется холловской ЭДС или холловской разностью потенциалов,



$$U_H = R_H BI / b = R_H Bjl, \quad (1)$$

где  $b$  – толщина образца (см. рисунок);  $h$  – его ширина;  $I$  – сила тока;  $j$  – плотность тока, определяемая по формуле

$$j = \frac{I}{S} = \frac{US}{\rho l S} = \frac{U}{\rho l}. \quad (2)$$

Длина образца  $l$  мала, поэтому нелинейностью тока в образце можно пренебречь и считать, что выполняется закон Ома  $I = U/R = US/(\rho l)$ , где  $U$  – разность потенциалов на концах проводника;  $S$  – площадь сечения образца, перпендикулярная к направлению тока.

Постоянная Холла для полупроводника  $p$ -типа равна

$$R_H = A / (en_p), \quad (3)$$

где  $e$  – заряд носителя (дырки);  $n_p$  – концентрация дырок;  $A$  – константа, при рассеянии на ионизированных примесях  $A = 1,95$ .

Решив совместно уравнение (1), (2), (3), найдём концентрацию  $n_p$ . Подвижность носителей определим из соотношения:

$$R_H / \rho A = u_p. \quad (4)$$

Выразив  $n_p$  из (3), а постоянную Холла из (1), подставив выражение (2) в формулу (1), находим концентрацию дырок

$$n_p = \frac{A}{eR_H} = \frac{AUBh}{eU_H\rho l}.$$

Подставим численные значения:

$$n_p = \frac{1,95 \cdot 10 \cdot 5 \cdot 10^{-1} \cdot 10^{-2}}{5 \cdot 10^{-2} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 2,5 \cdot 10^{-2} \cdot 5 \cdot 10^{-2}} = 0,975 \cdot 10^{22} \approx 10^{22} \text{ м}^{-3}.$$

Подставив выражение (1), (2), (3), в формулу (4), находим подвижность:

$$u_p = \frac{R_H}{\rho A} = \frac{U_n \rho l}{UBh\rho A} = \frac{U_n l}{UBhA}.$$

Подставим значения:

$$u_p = \frac{5 \cdot 10^{-2} \cdot 5 \cdot 10^{-2}}{10 \cdot 5 \cdot 10^{-1} \cdot 10^{-2} \cdot 1,95} = 2,56 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).$$

**Ответ:**  $n_p = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ ;  $u_p = 2,56 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с}).$

### 4.2.3 Задачи для решения на практических занятиях

1. Определить отношение концентрации свободных электронов при  $T = 0 \text{ К}$  в литии к концентрации свободных электронов в цезии. Уровни Ферми в этих металлах соответственно равны 4,7 эВ и 1,5 эВ.

2. Вычислить СИ удельное сопротивление собственного германия при температуре 300 К, если известно, что концентрация электронов при этой температуре  $2,2 \cdot 10^{13} \text{ 1/см}^3$ . Подвижность электронов  $3,8 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ , а дырок –  $1,8 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

3. При температуре 300 К концентрация носителей заряда в кремнии равна  $6 \cdot 10^{16} \text{ 1/м}^3$ . Во сколько раз возрастет концентрация

носителей при увеличении температуры в два раза? Ширина запрещенной зоны кремния равна 1,2 эВ.

4. Определить в СИ примесную удельную электропроводность германия при комнатной температуре, если известно, что концентрация донорной примеси  $5 \cdot 10^{21} \text{ 1/м}^3$ , а подвижность электронов в германии  $0,38 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

5. Вычислить в СИ удельное сопротивление собственного кремния при температуре 300 К, если известно, что концентрация электронов при этой температуре равна  $1,05 \cdot 10^{10} \text{ 1/см}^3$ , а подвижность электронов и дырок равны  $1,45 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$  и  $0,5 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$  соответственно.

6. Во сколько раз увеличится удельная электропроводность германия при возрастании температуры от 300 К до 600 К? Ширина запрещенной зоны германия равна 0,75 эВ.

7. Концентрация носителей заряда в германии при температуре 300 К равна  $2 \cdot 10^{16} \text{ 1/м}^3$ . При увеличении температуры концентрация носителей возросла до  $2 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3$ . На сколько градусов Цельсия увеличилась температура? Ширина запрещенной зоны германия равна 0,75 эВ.

8. Средняя длина свободного пробега электрона при температуре 300 К в кремнии *p*-типа равна 147 нм. Определить в СИ подвижность электронов в кремнии.

9. Определить в СИ подвижность электронов в германии *n*-типа, для которого при некоторых условиях удельное сопротивление  $1,6 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ , а постоянная Холла  $7 \cdot 10^3 \text{ см}^3/\text{Кл}$ .

10. Вычислить в эВ максимальную энергию, которую могут иметь свободные электроны в меди при температуре 0 К. Принять, что на каждый атом меди приходится по одному электрону. Плотность меди  $8,9 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ , а массовое число 64.

### Тестовые задания

1. Выберите формулы, с помощью которых можно рассчитать проводимость собственного полупроводника ( $\sigma_0$  – начальная проводимость;  $\Delta E$  – энергия активации;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $e$  – заряд электрона;  $n$  – концентрация носителей тока;  $u_n$  и  $u_p$  – подвижности электронов и дырок соответственно).



$$\text{а) } \sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}; \quad \text{б) } \sigma = \sigma_0 e^{+\frac{\Delta E}{2kT}};$$

$$\text{в) } \sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}; \quad \text{г) } \sigma = \sigma_0 e^{+\frac{\Delta E}{kT}};$$

$$\text{д) } \sigma = en(u_n + u_p); \quad \text{е) } \sigma = enu_n;$$

$$\text{ж) } \sigma = enu_p.$$

Варианты ответов:

- 1) а, д;      2) а, е;      3) а, ж;      4) б, д;      5) б, е;  
 6) б, ж;      7) в, д;      8) в, е;      9) в, ж;      10) г, д;  
 11) г, е;      12) г, ж.

2. Где располагается уровень Ферми в акцепторном полупроводнике при низких температурах?

Варианты ответов:

- 1) Между донорным уровнем и дном зоны проводимости;
- 2) Между акцепторным уровнем и потолком валентной зоны;
- 3) В валентной зоне вблизи ее потолка;
- 4) В зоне проводимости вблизи ее дна;
- 5) Посередине запрещенной зоны.

3. Какие носители заряда являются основными в полупроводнике *p*-типа?

Варианты ответов:

- 1) Электроны и дырки.
- 2) Только электроны.
- 3) Только дырки.
- 4) Протоны.
- 5) Куперовские пары.

4. Выберите формулу, по которой можно рассчитать красную границу внутреннего фотоэффекта в собственном полупроводнике ( $h$  – постоянная Планка;  $c$  – скорость света в вакууме;  $\Delta E_0$  – ширина запрещенной зоны;  $\Delta E_d$  – энергия активации донорной примеси;  $\Delta E_a$  – энергия активации акцепторной примеси;  $A$  – работа выхода).

Варианты ответов:

$$1) \lambda_0 = \frac{hc}{A}; \quad 2) \lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_0};$$

$$3) \lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_a}; \quad 4) \lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_d}.$$

5. При введении в полупроводник примеси с валентностью на единицу меньшей, чем у исходного полупроводника, получается ...

Варианты ответов:

- 1) акцепторный полупроводник;
- 2) донорный полупроводник;
- 3) туннельный полупроводник;
- 4) собственный полупроводник;
- 5) полупроводник с большей электропроводностью.

#### 4.2.4 Задачи для самостоятельного решения

1. Определить в СИ примесную удельную электропроводность германия, который содержит индий в концентрации  $2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ . Подвижность дырок в германии принять равной  $0,18 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

2. Некоторый примесный полупроводник имеет решетку типа алмаза и обладает только дырочной проводимостью. Определить концентрацию дырок, если постоянная Холла равна  $40 \cdot 10^{-5} \text{ м}^3/\text{Кл}$ .

3. Проводимость некоторого металла составляет  $2 \cdot 10^6 \text{ сим}$ , а концентрация электронов проводимости  $8 \cdot 10^{22} \text{ 1/см}^3$ . Определить время свободного пробега электрона в этом металле.

4. Определить примесную удельную электропроводность полупроводника при комнатной температуре, если известно, что концентрация донорной примеси равна  $3,27 \cdot 10^{19} \text{ 1/м}^3$ , а подвижность электронов равна  $25 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

5. При нагревании кремния от  $300 \text{ К}$  до некоторой температуры его удельное сопротивление уменьшилось в 27 раз. Определить в СИ температуру, до которой был нагрет кремний. Ширина запрещенной зоны кремния равна  $1,2 \text{ эВ}$ .

6. Германий содержит акцепторную и донорную примеси, их концентрации соответственно равны  $2,56 \cdot 10^{25} \text{ 1/м}^3$  и  $5,42 \cdot 10^{25} \text{ 1/м}^3$ . Найти постоянную Холла для этого полупроводника, если подвижности электронов и дырок в нем соответственно равны  $0,38 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$  и  $0,18 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

7. Концентрация носителей заряда в собственном полупроводнике при температуре  $323 \text{ К}$  равна  $131 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ . При какой температуре концентрация носителей заряда станет равной  $280 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$ . Ширина запрещенной зоны данного полупроводника равна  $1075 \text{ эВ}$ . Зависимость начальной концентрации от температуры не учитывать.

8. На сколько удельное сопротивление донорного полупроводника с концентрацией носителей заряда  $3095 \cdot 10^{20} \text{ л/м}^3$  меньше удельного сопротивление акцепторного полупроводника с той же концентрацией носителей, если подвижность электронов  $33 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$  а дырок  $17 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

9. Найти в эВ минимальную энергию, необходимую для образования пары электрон – дырка в кристалле арсенида галлия, если его электропроводность изменяется в 10 раз при изменении температуры от  $+20 \text{ }^\circ\text{C}$  до  $-3 \text{ }^\circ\text{C}$ .

10. Концентрация носителей тока в собственном кремнии равна  $5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ , подвижность электронов –  $0,12 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$  и дырок –  $0,05 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ . Определить в МОм сопротивление кремниевого стержня длиной 2 см и сечением  $1 \text{ мм}^2$ .

### Тестовые задания

1. Выберите формулы, с помощью которых можно рассчитать проводимость донорного полупроводника ( $\sigma_0$  – начальная проводимость;  $\Delta E$  – энергия активации;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $e$  – заряд электрона;  $n$  – концентрация носителей тока;  $u_n$  и  $u_p$  – подвижности электронов и дырок соответственно).

а)  $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$ ;                      б)  $\sigma = \sigma_0 e^{+\frac{\Delta E}{2kT}}$ ;

в)  $\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$ ;                      г)  $\sigma = \sigma_0 e^{+\frac{\Delta E}{kT}}$ ;

д)  $\sigma = en(u_n + u_p)$ ;                      е)  $\sigma = enu_n$ ;

ж)  $\sigma = enu_p$ .

Варианты ответов:

- |           |           |          |          |           |
|-----------|-----------|----------|----------|-----------|
| 1) а, д;  | 2) а, е;  | 3) а, ж; | 4) б, д; | 5) б, е;  |
| 6) б, ж;  | 7) в, д;  | 8) в, е; | 9) в, ж; | 10) г, д; |
| 11) г, е; | 12) г, ж. |          |          |           |

2. Где располагается уровень Ферми в донорном полупроводнике при высоких температурах?

Варианты ответов:

- 1) Между донорным уровнем и дном зоны проводимости;
- 2) Между акцепторным уровнем и потолком валентной зоны;
- 3) В валентной зоне вблизи ее потолка;

4) В зоне проводимости вблизи ее дна;

5) Посредине запрещенной зоны.

3. Какие носители заряда являются основными в собственном полупроводнике?

Варианты ответов:

1) Электроны и дырки.

2) Только электроны.

3) Только дырки.

4) Протоны.

5) Куперовские пары.

4. Выберите формулу, по которой можно рассчитать красную границу внутреннего фотоэффекта в донорном полупроводнике ( $h$  – постоянная Планка;  $c$  – скорость света в вакууме;  $\Delta E_0$  – ширина запрещенной зоны;  $\Delta E_d$  – энергия активации донорной примеси;  $\Delta E_a$  – энергия активации акцепторной примеси;  $A$  – работа выхода).

Варианты ответов:

$$1) \lambda_0 = \frac{hc}{A};$$

$$2) \lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_0};$$

$$3) \lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_a};$$

$$4) \lambda_0 = \frac{hc}{\Delta E_d}.$$

5. При введении в полупроводник примеси с валентностью на единицу меньшей, чем у исходного полупроводника, получается ...

Варианты ответов:

1) акцепторный полупроводник;

2) донорный полупроводник;

3) туннельный полупроводник;

4) собственный полупроводник;

5) полупроводник с большей электропроводностью.

#### 4.2.5 Вопросы для самоконтроля

1. Какими процессами в основном обусловлена проводимость полупроводника  $n$ -типа?

2. Какими процессами в основном обусловлена проводимость полупроводника  $p$ -типа?

3. Какой получается полупроводник при введении в него примеси с валентностью на единицу меньше, чем у исходного полупроводника?
4. Где на зонной схеме располагается уровень Ферми при высоких температурах в донорном полупроводнике?
5. Где располагаются уровни акцепторов в полупроводнике?
6. Укажите, где располагается уровень Ферми при  $T = 0$  К в невырожденном акцепторном полупроводнике.
7. Какой получается полупроводник при введении в него примеси с валентностью на единицу меньше, чем у исходного полупроводника?
8. Где на зонной схеме в полупроводнике располагаются уровни доноров?
9. Проводимость полупроводника какого типа в основном обусловлена переходами электронов из валентной зоны на акцепторные уровни и движением дырок в валентной зоне?
10. Как зависит удельное сопротивление металлов от температуры?
11. Как зависит от температуры удельная проводимость примесного невырожденного полупроводника?
12. В чём заключается эффект Холла?
13. В чём заключается явление внутреннего фотоэффекта?
14. Чем определяется «красная граница» внутреннего фотоэффекта для различных типов полупроводников?

# 5 ОТВЕТЫ К ЗАДАНИЯМ ДЛЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ И САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

## 1 Модель атома. Теория бора. Характеристическое рентгеновское излучение

### Практические занятия

$$1. r_{\min} = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0 m_\alpha c^2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) = 1,2 \cdot 10^{-14} \text{ м.} \quad 2. N = n(n-1)/2.$$

$$3. n = 1/\sqrt{1 - \pi c(\lambda_1 + \lambda_2)/2\lambda_1\lambda_2 R} = 4.$$

$$4. \lambda_{He} = \frac{8\epsilon_0^2 c h^3}{Z^2 m e^4 \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)} = \frac{\lambda_H}{4} = 1,22 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 122 \text{ нм.} \quad 5. 364,5 \text{ нм;}$$

$$656,1 \text{ нм.} \quad 6. \Delta\lambda = \lambda_H - \lambda_D \approx \lambda_H \frac{m_e}{2m_p} = 0,033 \text{ нм;} \quad \Delta A = 3,7 \cdot 10^{-3} \text{ эВ.}$$

$$7. 1,09 \text{ Мм/с.} \quad 8. 13,5 \text{ нм.} \quad 9. 91,8 \text{ В.} \quad 10. \text{ Ниобий, } Z = 41.$$

### Самостоятельная работа

$$1. n = e^2 / (2\epsilon_0 h \nu_n) = 3. \quad 2. 1,88; \quad 0,657; \quad 0,486 \text{ мкм.} \quad 3. \text{ He}^+.$$

$$4. 91,1 \text{ нм; } 121,6 \text{ нм.} \quad 5. Z = 26, \text{ железо.} \quad 6. n_j = 1/\sqrt{1 - \frac{E}{chn}} = 3, \frac{r_3}{r_1} = 9.$$

$$7. E_{\min} = 8\hbar R Z^2 / 9 = 48,5 \text{ эВ.} \quad 8. 97,3; \quad 102,6; \quad 121,6 \text{ нм.} \quad 9. 1,52 \cdot 10^{-16} \text{ с;}$$

$$4,13 \cdot 10^{16} \text{ рад/с.} \quad 10. 8 \text{ кВ.}$$

## 2.1 Волновые свойства вещества. Волны де Бройля.

### Соотношение неопределенности

#### Практические занятия

$$1. \text{ а) } 7,3 \cdot 10^{-10} \text{ м;} \quad \text{ б) } 1,44 \cdot 10^{-10} \text{ м;} \quad \text{ в) } 6,6 \cdot 10^{-29} \text{ м.}$$

$$2. \lambda = \frac{h}{eBr} = 1,8 \text{ пм.}$$

$$3. \lambda = \frac{h}{2} \sqrt{\frac{2(\eta^2 - 1)}{m \cdot \Delta E}} = 0,15 \text{ нм.}$$

$$4. \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mkT}} = 132 \text{ пм.}$$

$$5. \lambda = \frac{\lambda_\kappa}{\sqrt{1 + 2mc\lambda_\kappa/h}} = 3,3 \text{ пм.}$$

6.  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meU}} / \sqrt{1 + \frac{eU}{2mc^2}}$ . При указанных напряжениях длины волн

$\lambda$  соответственно для электронов: 1,22 нм; 0,122 нм; 3,88 пм; 4,06 пм;  $1,24 \cdot 10^{-16}$  м;  $1,24 \cdot 10^{-21}$  м; для протонов: 28,5 пм; 2,85 пм; 0,905 пм;  $9,05 \cdot 10^{-14}$  м;  $1,14 \cdot 10^{-16}$  м;  $1,24 \cdot 10^{-21}$  м. 7.  $\Delta x \approx c\tau = 3$  м,

$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi c\tau} \approx 3 \cdot 10^{-8}$ . 8.  $\Delta\lambda \approx \frac{\lambda^2}{c \cdot \Delta t} \approx 10^{-4}$  нм;  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx \frac{\lambda}{c \cdot \Delta t} \approx 10^{-6}$ .

9.  $\Delta v \approx 1 \cdot 10^6$  м/с;  $v_1 = 2,2 \cdot 10^6$  м/с. 10.  $\Delta x = \frac{\hbar l}{\sqrt{2md^2 eU}} = 8$  нм.

### Самостоятельная работа

1.  $1,67 \cdot 10^{-27}$  кг. 2.  $\lambda_0 = 3,9 \cdot 10^{-12}$  м,  $\lambda_p = 3,7 \cdot 10^{-12}$  м. 3. 26,1 В.

4.  $\lambda = 3,7 \cdot 10^{-13}$  м,  $\Delta x > 0,59 \cdot 10^{-10}$  м,  $\lambda/\Delta x \approx 6,3 \cdot 10^{-3}$ .

5.  $K_{\text{мин}} \approx \frac{2\hbar^2}{ml^2} = 15$  эВ,  $\Delta x = l/2$ ,  $p \approx \Delta p$ . 6.  $\lambda_e/\lambda_p = 43$ . 7. 41 кэВ.

8. 4,9 мкм. 9.  $10^4$  м/с; 10 м/с;  $10^{-20}$  м/с. 10.  $\frac{\Delta v}{v} \approx \frac{2\hbar}{\sqrt{2ml^2 K}} = 1,2 \cdot 10^{-4}$ ,

$\Delta x = \frac{l}{2}$ .

## 2.2 Уравнение Шредингера. Частицы в потенциальной яме

### Практические занятия

1. 1,83. 2. 4. 3. 0,195. 4. 5. 5.  $E_2/E_1 = 9$ . 6.  $3,01 \cdot 10^{-5}$  эВ. 7. 3 эВ.

8. 3. 9. 0,03 эВ. 10. В 1,5 раза.

### Самостоятельная работа

1.  $5,7 \cdot 10^{-9}$  эВ. 2. 0,14 эВ. 3.  $9,43 \cdot 10^{-3}$  эВ. 4. 0,125. 5.  $1,34 \cdot 10^{-26}$  эВ.

6. 0,475. 7. 39,19 эВ. 8. 4,512 эВ. 9.  $0,91 \cdot 10^{-6}$  эВ. 10. 1,63.

## 2.3 Потенциальный барьер. Туннельный эффект

### Практические занятия

1. 172,8 пм. 2. 0,22 нм. 3. 0,18. 4. 1,41. 5. 0,0295. 6. 2,6. 7. 0,97.

8. 0,52 нм. 9. 55,6 эВ. 10. 1,03.

### Самостоятельная работа

1. 1. 2.  $U_0 - E = \frac{\hbar^2 \left( \ln \frac{1}{W} \right)^2}{8ml^2} = 0,202$ . 3. 0,1 мэВ. 4. 2. 5. 0,8.  
6. 0,008. 7. 0,854. 8. 2,57. 9. 418 пм. 10. 1,73.

### 2.4 Квантовые числа

#### Практические занятия

1.  $\langle r \rangle = 3r_1/2$ ;  $\langle U \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}$ . 2.  $n=3$ :  $l=0$ ,  $L_l=0$ ;  $l=1$ ,  
 $L_l=1,49 \cdot 10^{-34}$  Дж·с;  $l=2$ ,  $L_l=2,6 \cdot 10^{-34}$  Дж·с. 3.  $35^\circ 10'$ . 4.  $3S_{1/2}$ ;  
 $3P_{1/2}$ ;  $3P_{3/2}$ ;  $3D_{3/2}$ ;  $3D_{5/2}$ . 5.  $L_l = \sqrt{6}\hbar$ ;  $L_{l_z} = 0; \pm\hbar; \pm 2\hbar$ ;  $L_S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ ;  
 $L_{S_z} = \pm \frac{1}{2}\hbar$ . 6. а)  $\mu_l = 0$ ,  $\mu_{l_z} = 0$ ,  $\mu_S = \sqrt{3}\mu_B$ ,  $\mu_{S_z} = 2\mu_B$ . б)  $\mu_l = \sqrt{2}\mu_B$ ,  
 $\mu_{l_z} = 0, \pm\mu_B$ ,  $\mu_S = \sqrt{3}\mu_B$ ,  $\mu_{S_z} = 2\mu_B$ . в)  $\mu_l = \sqrt{6}\mu_B$ ,  $\mu_{l_z} = 0, \pm\mu_B, \pm 2\mu_B$ ,  
 $\mu_S = \sqrt{3}\mu_B$ ,  $\mu_{S_z} = 2\mu_B$ . г)  $\mu_l = \sqrt{12}\mu_B$ ,  $\mu_{l_z} = 0, \pm\mu_B, \pm 2\mu_B, \pm 3\mu_B$ ,  
 $\mu_S = \sqrt{3}\mu_B$ ,  $\mu_{S_z} = 2\mu_B$ . 7.  $\varphi_i = 5,1$  В. 8.  $\sigma_S = -4,13$ . 9. а)  ${}^2F_{7/2}$ ;  
 $L_{\max} = \hbar\sqrt{63}/2$ ; б)  ${}^3F_4$ ;  $L_{\max} = 2\hbar\sqrt{5}$ . 10. а) 0, 1, 2, 3, 4;  
б) и в) 1, 2, 3, 4, 5; г) 1/2, 3/2, 5/2.

#### Самостоятельная работа

1. а)  $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$ ; б)  $\langle r \rangle = \frac{a}{2}$ . 2. а)  $2\hbar^2$ ; б)  $12\hbar^2$ . 3. а)  $j = \frac{1}{2}$ ;  
б)  $j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ ; в)  $j = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$ ; г)  $j = \frac{7}{2}, \frac{5}{2}$ . 4. а)  ${}^2S_{1/2}$ ; б)  ${}^2P_{1/2,3/2}$ ; в)  ${}^2D_{3/2,5/2}$ ;  
г)  ${}^2F_{5/2,7/2}$ . 5.  ${}^2D_{7/2}$ ;  ${}^3F_4$ ;  ${}^3F_3$ ;  ${}^3S_1$ . 6.  $L = 3, 4$ . 7. а)  $\mu = \sqrt{2}\mu_B$ ; б)  $\mu = 0$ ;  
в)  $\mu = 2\sqrt{2}\mu_B$ ; г), д), е)  $\mu = 0$ . 8.  $E_i = 5$  эВ. 9. 2 в  $s$ -состоянии; 2/3 и 4/3  
в  $p$ -состоянии. 10.  $\sigma_S = -0,41$ ;  $\sigma_P = -0,04$ .

### 3 Элементы квантовой статистики

#### Практические занятия

1. 25,3 эВ. 2. 5,86 эВ. 3. 3,45 мм<sup>3</sup>. 4.  $0,24 \cdot 10^5$  МПа. 5. 6,63 эВ.  
6. 0,956. 7.  $1,85 \cdot 10^6$  м/с. 8.  $3,08 \cdot 10^4$  К. 9.  $34,1 \cdot 10^3$  К. 10. 1,85.



*Самостоятельная работа*

1.  $5,9 \cdot 10^4$  К.      2. 0,136.      3. 0,344.      4.  $0,57 \cdot 10^{-23}$  эВ.  
5.  $0,91 \cdot 10^{41}$  с<sup>2</sup>/м<sup>2</sup>·кг.      6. 0,45 эВ.      7. 0,363 нм.      8.  $1,33 \cdot 10^6$  м/с.  
9.  $4,46 \cdot 10^7$  Дж.      10.  $0,3 \cdot 10^{-29}$ .

**4.1 Тепловые свойства твёрдых тел**

*Практические занятия*

1. 0,026 эВ;      0,048 нм.      2.  $\langle N_{\phi m} \rangle = [\exp(\theta_D/T) - 1]^{-1} = 1,54$ .  
3.  $\langle \omega \rangle = 3\omega_D/4 = 3k\theta_D/4\hbar = 2,9 \cdot 10^{13}$  с<sup>-1</sup>.      4.  $E_0 = 9R\theta_D/8\mu = 48,6$  Дж/г.  
5.  $c_{\mu 2} = (T_2/T_1)^3 c_{\mu 1} = 0,022$  Дж/(моль·К).      6. 860 Дж.  
7.  $c_1/c_2 = (\mu_1/\mu_2)(\theta_{D2}/\theta_{D1}) = 1,4$ .  
8.  $c_V = \frac{\pi^2 k^2 N_A}{2 E_F M} \rho_1 T = 13,7$  кДж/(моль·К).      9. 4,1.      10. 60 Н/м.

*Самостоятельная работа*

1.  $\theta_D = \pi\hbar 2\nu\sqrt{\pi n_0}/k = 406$  К.      2. Уровни станут гуще в 2 раза.  
3.  $v \approx k\theta_D/\hbar \cdot \sqrt[3]{6\pi^2 n_0} = 3,4$  км/с.      4. 3 кДж/моль.  
5.  $\omega_{\max} = (kT/\hbar) \cdot \sqrt[3]{12\pi^4 R/5\mu c} = 6 \cdot 10^{13}$  с<sup>-1</sup>.  
6.  $\theta_D = \sqrt[3]{(3\pi^4 mR/5MQ)(T_2^4 - T_1^4)} \approx 330$  К.      7.  $C_\mu = 21,3$  Дж/(моль·К).  
8.  $c_{V1} = 42$  Дж/(К·м<sup>3</sup>);       $c_{V2} = 21$  Дж/(К·м<sup>3</sup>).      9.  $3,5 \cdot 10^{-5}$  К<sup>-1</sup>.  
10. 1,25 кН.

**4.2 Электропроводность твердых тел**

*Практические занятия*

1. 5,55.      2. 0,51 Ом·м.      3.  $1 \cdot 10^5$  раз.      4. 304 (Ом·м)<sup>-1</sup>.      5. 3052 Ом·м.  
6. 1400 раз.      7. 520 °С.      8. 0,221 м<sup>2</sup>/В·с.      9. 0,4375 м<sup>2</sup>/В·с.      10. 6,98 эВ.

*Самостоятельная работа*

1. 576 (Ом·м)<sup>-1</sup>.      2.  $1,84 \cdot 10^{22}$  м<sup>-3</sup>.      3.  $1,78 \cdot 10^{-15}$  с.      4. 131 (Ом·м)<sup>-1</sup>.  
5. 350 К.      6.  $0,17 \cdot 10^{-6}$  м<sup>3</sup>/Кл.      7. 388 К.      8.  $\rho_p - \rho_n = 5,76 \cdot 10^{-5}$  Ом·м.  
9.  $\Delta E = 1,32$  эВ.      10. 14,7 МОм.

## Рекомендуемая литература

1. Савельев И.В. Курс общей физики / И.В. Савельев. – СПб.: Наука ; Лань ; 2001, 2003, 2007. – В 3 т.
2. Трофимова Т.И. Курс физики / Т.И. Трофимова. – М.: Академия, 2006, 2007, 2008.
3. Детлаф А.А. Курс физики / А.А. Детлаф, Б.М. Яворский. – М.: Академия, 2003, 2007.
4. Савельев И.В. Сборник вопросов и задач по общей физике / И.В. Савельев. – 5-е изд., стереотип. – СПб.: Лань, 2016. – 292 с.
5. Иродов И.Е. Задачи по общей физике: учеб. пособие для вузов / И.Е. Иродов. – 7-е изд., стереотип. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. – 431 с.
6. Чертов А.Г. Задачник по физике: учеб. пособие для вузов / А.Г. Чертов, А.А. Воробьёв. – 8-е изд., перераб. и доп.– М.: Физматлит, 2007. – 640 с.
7. Волькенштейн В.С. Сборник задач по общей физике / В.С. Волькенштейн. – СПб: ВШ, СпецЛит, 1978–2001.
8. Гольдин Л.Л. Введение в квантовую физику / Л.Л. Гольдин, Г.И. Новикова. – М.: Наука, 1988.
9. Чужков Ю.П. Элементы атомной физики и квантовой механики: сборник тестовых вопросов / Ю.П. Чужков. – Томск: Томск. гос. ун-т систем упр. и радиоэлектроники, 2011. – 68 с.

Учебное издание  
**Лячин** Александр Владимирович  
**Чужков** Юрий Петрович  
АТОМНАЯ ФИЗИКА И ФИЗИКА ТВЁРДОГО ТЕЛА  
Учебно-методическое пособие  
Формат 60x84/16. Усл.-печ. л. 8,6.

---

Томский государственный университет  
систем управления и радиоэлектроники.  
634050, г. Томск, пр. Ленина, 40.  
Тел. (3822) 533018.