МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯИ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ГОУ ВПО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Новомосковский институт (филиал)

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

конспект лекций

Новомосковск 2011

УДК 535.14+539.18 ББК 22.343+22.314 К 321

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, профессор, зав. лаб. ИРЭ РАН *Проклов В.В.* Доктор химических наук, профессор, Зав. кафедрой физической и коллоидной химии *Кизим Н.Ф.* (НИ РХТУ им Д.И. Менделеева)

Составители: Сивкова О.Д., Подольский В.А., Резвов Ю.Г.

К 321 Квантовая физика. Конспект лекций/ ГОУ ВПО РХТУ им. Д.И. Менделеева, Новомосковский институт (филиал), Новомосковск, 2011.- 86 с.

Учебное пособие написано в соответствии с лекционным курсом кафедры «Физика» НИ РХТУ и содержит изложение основ квантовой оптики, квантовой механики, квантовой статистики и физики твердого тела. Данное пособие предназначено для самостоятельной работы студентов технических специальностей.

Ил. 40. Библиогр.: 6 назв.

УДК 535.14+539.18 ББК 22.343+22.314

ГОУ ВПО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Новомосковский институт (филиал), 2011

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящее пособие представляет собой краткое изложение разделов «Квантовая оптика», «Квантовая механика», «Квантовая статистика» и «Физика твердого тела» курса общей физики. Оно полностью соответствует рабочей программе НИ РХТУ по физике, что обеспечивает более целостное и логичное изложение материала по сравнению со стандартными учебными пособиями [1, 2] для вузов, рассчитанными на программу по физике большего объема. Пособие предназначено для студентов НИ РХТУ всех технических специальностей.

В пособии рассмотрен круг явлений, обусловленных квантовыми свойствами света (тепловое излучение, фотоэффект, эффект Комптона), изложены основные представления и законы квантовой механики, а также их применение к решению некоторых квантовомеханических задач (частица в потенциальной яме, квантовый осциллятор, туннельный эффект, атом водорода). Даются необходимые сведения по физической статистике и физике твердого тела, на основе которых описывается внутренняя структура и электрические свойства твердых тел. Особое внимание уделено простому, четкому и ясному пояснению ряда основных законов квантовой физики. Даны словесные формулировки определений физических величин и законов, что позволяет студентам лучше понять физическую сущность изучаемых явлений.

В предлагаемом пособии авторы старались использовать наиболее простые математические выводы, не теряя при этом общности полученных результатов. Пояснения и математические выводы сопровождаются большим количеством подробных иллюстраций, что, несомненно, должно способствовать более осознанному восприятию излагаемого материала.

Данное пособие может быть использовано для получения минимального объема знаний по излагаемому разделу физики, а также при решении задач и подготовке к выполнению лабораторных работ. При работе с литературой, рекомендованной Министерством образования Российской федерации, можно выбрать те разделы, на которые следует обратить особое внимание, а также пособие послужит дополнительным материалом, способствующим более ясному пониманию этих разделов.

введение

Физика является одной из фундаментальных наук, составляющих основу современной техники. Инженеру любой специальности требуются глубокие знания не только классической, но и квантовой физики, достижения которой сейчас широко используются во всех отраслях науки и техники. Так некоторые оптические явления можно объяснить и количественно описать, только предположив, что свет представляет собой поток частиц. Эти частицы называют квантами света или фотонами. Квантовая оптика изучает явления, в которых проявляются квантовые свойства света. К таким явлениям прежде всего можно отнести фотоэффект, тепловое излучение, эффект Комптона.

Существует также ряд явлений, которые можно объяснить и описать, лишь предположив, что микрообъекты обладают наряду с корпускулярными и волновыми свойствами. Движение микрообъектов имеет статистический характер и подчиняется законам квантовой механики – науки о движении микрочастиц во внешних силовых полях. Состояние частицы в квантовой механике задается волновой функцией. Одним из основных уравнений квантовой механики является уравнение Шредингера, из которого следует квантование энергии частицы во внешнем силовом поле. Если известна волновая функция в начальный момент времени и силовое поле, в котором движется частица, то, решив уравнение Шредингера можно найти волновую функцию в последующие моменты времени и рассчитать вероятность нахождения частицы в данном месте пространства. Таким методом можно решить задачи о движении частицы в потенциальной яме, прохождении частицы через потенциальный барьер, квантовом гармоническом осцилляторе, электроне в атоме водорода и др.

В системах, состоящих из большого числа микрочастиц, проявляются статистические закономерности. Поведение таких систем подчиняется законам физической статистики. Распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна описывают распределение по состояниям коллективов фермионов (частиц с полуцелым спином) и бозонов (частиц с нулевым или целочисленным спином) соответственно. Любое твердое тело представляет совокупность большого числа частиц. Поэтому тепловые, электрические, магнитные и другие свойства твердых тел могут быть описаны законами физической статистики. Эти законы являются основой современной радио- и микроэлектроники.

1. Квантовая оптика

1.1. Тепловое излучение

Тепловое излучение – это электромагнитное излучение, испускаемое телами за счет их внутренней энергии. Оно происходит при любой температуре и представляет собой электромагнитные волны во всём диапазоне длин волн ($0 < \lambda < \infty$).

Интенсивность теплового излучения характеризуется **пото**ком энергии – энергией, испускаемой телом за единицу времени:

$$\boldsymbol{\Phi} = \frac{dW}{dt} \,, \tag{1.1}$$

где dW - энергия, испускаемая телом за время dt.

Основной количественной характеристикой теплового излучения является излучательность (энергетическая светимость) – энергия, испускаемая единицей поверхности тела за единицу времени во всем диапазоне длин волн и по всем направлениям:

$$R = \frac{dW}{dS \cdot dt}, \qquad (1.2)$$

где dW - энергия, испускаемая элементом поверхности dS тела за время dt. Излучательность зависит от термодинамической температуры T тела.

Распределение энергии теплового излучения по длинам волн является нераномерным и характеризуется спектральной плотностью излучательности (испускательной способностью) – энергией, испускаемой единицей поверхности тела за единицу времени в единичном диапазоне длин волн:

$$r = \frac{dW}{dS \cdot dt \cdot d\lambda},$$
 (1.3)

где dW - энергия, испускаемая элементом поверхности dS за время dt в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$. В пределах этого диапазона r можно считать постоянной. Умножив r на $d\lambda$, получим энергию dR, испускаемую единицей поверхности за единицу времени в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$:

$$dR = r \cdot d\lambda . \tag{1.4}$$

Сумма *dR* для всех длин волн дает излучательность *R* тела во всем диапазоне длин волн. Поэтому, интегрируя (1.4) по λ от 0 до ∞ ,

получим связь излучательности и спектральной плотности излучательности: $R = \int_{0}^{\infty} r \cdot d\lambda$. (1.5)

Тела не только испускают энергию, но могут отражать и поглощать падающую на них энергию. Пусть на площадку dSповерхности тела за время dt падает энергия dW_{nad} . Часть этой энергии может отразиться, а часть – поглотиться. Поглощательной способностью тела называется отношение поглощенной энергии dW_{no2n} . к энергии dW_{nad} , падающей на тело (за одно и то же время, на одну и ту же площадку):

$$a = \frac{dW_{nozn.}}{dW_{na\partial.}}.$$
 (1.6)

Т.к. тело не может поглотить больше энергии, чем на него падает $(dW_{no2n.} < dW_{nad.})$, то поглощательная способность тел может принимать значения: $0 \le a \le 1$. Абсолютно черное тело (АЧТ)– это

тело, полностью поглощающее падающее на него излучение всех длин волн. Для таких тел a = 1 во всем диапазоне длин волн. В природе АЧТ не существует, близки к ним сажа и платиновая чернь. Моделью АЧТ может служить замкнутая полость с небольшим отверстием (рис. 1.1). Свет, попадая в отверстие, многократно отражается от стенок, поглощается ими и не выходит наружу.



Рис. 1.1

Испускательная и поглощательная способности тел взаимосвязаны: тело которое больше энергии поглощает, должно и больше испускать. Отсюда вытекает соотношение:

$$\frac{r_1}{a_1} = \frac{r_2}{a_2} = \frac{r_3}{a_3} = \dots,$$
(1.7)

где индексы 1, 2, 3 относятся к разным телам. В соответствии с выражением (1.7) **закон Кирхгофа** утверждает, что отношение спектральной плотности излучательности к поглощательной способности не зависит от химической природы тел, а является одной и той же для всех тел универсальной функцией $f(\lambda, T)$ от длины волны λ и температуры T:

$$\frac{r}{a} = f(\lambda, T). \tag{1.8}$$

Для абсолютно чёрного тела: a = 1 и $r = f(\lambda, T)$. Следовательно, универсальная функция Кирхгофа $f(\lambda, T)$ равна спектральной

плотности излучательности АЧТ.При исследовании теплового излучения модели АЧТ (рис. 1.1) была получена экспериментальная зависимость спектральной плотности излучательности $r = f(\lambda, T)$ от длины волны λ , общий которой вид приведен на рис. 1.2. Вывести согласующееся опытом с $f(\lambda,T),$ выражение лля представлений исходя из классической физики, не



удалось. Классическая теория приводила к результату, который назвали ультрафиолетовой катастрофой: в области коротких длин волн $f(\lambda, T) \rightarrow \infty$ при $\lambda \rightarrow 0$. Чтобы получить функцию $f(\lambda, T)$, согласующуюся с экспериментом, **Планк выдвинул гипотезу**, согласно которой *испускание света происходит в виде отдельных порций энергии (квантов), пропорциональных частоте света:*

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{h}\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{h}\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{\lambda}}, \qquad (1.9)$$

где ε - энергия кванта света, $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с - постоянная Планка, v и λ - частота и длина волны излучения, $c = 3 \cdot 10^8 \ m/c$ - скорость света в вакууме.

Полученное Планком аналитическое выражение для универсальной функции $f(\lambda, T)$ называют **формулой Планка**:

$$f(\lambda,T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$
(1.10)

Здесь *k* – постоянная Больцмана; *T* – термодинамическая температура, *e*=2,7 – экспонента.

Из формулы Планка (1.10) можно вывести законы теплового излучения, которые были первоначально получены экспериментально. Для вывода закона Стефана-Больцмана учтем, что для АЧТ $r = f(\lambda, T)$, а также воспользуемся соотношением (1.5) и формулой Планка (1.10):

$$R = \int_{0}^{\infty} r d\lambda = \int_{0}^{\infty} f(\lambda, T) d\lambda = 2\pi h c^{2} \int_{0}^{\infty} \frac{d\lambda}{\lambda^{5} (e^{\frac{hc}{\lambda k T}} - 1)}$$
(1.11)

Интеграл в правой части соотношения (1.11) может быть вычислен - он пропорционален T^4 . Поэтому закон Стефана-Больцмана имеет вид:

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{T}^4 \,, \tag{1.12}$$

где коэффициент пропорциональности σ , получающийся после интегрирования и подстановки значений физических констант в правой части выражения (1.11), называют постоянной Стефана-Больцмана: $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \, \text{Вт/м}^2 \text{K}^4$. В соответствии с (1.12) закон Стефана-Больцмана утверждает, что излучательность абсолютно чёрного тела прямо пропорциональна четвёртой степени его термодинамической температуры.

На рис.1.2 видно, что функция $f(\lambda, T)$ имеет максимум. Для нахождения длины волны λ_m , при которой $f(\lambda, T)$ имеет максимальное значение, нужно взять производную от формулы Планка (1.10) и приравнять ее к нулю:

$$\frac{df(\lambda,T)}{d\lambda} = 0.$$
(1.13)

Решая получившееся при этом уравнение, получают закон смещения Вина:

$$\lambda_m = \frac{b}{T} \,, \tag{1.14}$$

где λ_m - длина волны, на которую приходится максимум спектральной плотности излучательности АЧТ, $b=2,9\cdot10^{-3}$ м·К – постоянная закона смещения Вина. Закон смещения Вина (1.14) показывает, что при повышении температуры длина волны λ_m , на которую приходится максимум спектральной плотности излучательности тела, смещается в область коротких длин волн. Подставив (1.14) в (1.10), можно найти максимальную спектральную плотность излучательности r_m АЧТ:

$$r_m = f(\lambda_m, T) = \frac{2\pi hc^2 T^5}{b^5} \cdot \frac{1}{\frac{hcT}{e^{bkT} - 1}}.$$
 (1.15)

Проведя в правой части (1.15) сокращения, подстановку значений физических констант и соответствующие вычисления, получим, что максимальная спектральная плотность излучательности АЧТ

$$r_m = CT^5, \tag{1.16}$$

т.е. пропорциональна пятой степени термодинамической температуры (постоянная $C=1,3\cdot10^{-5}$ Вт/м³·K⁵). Выражение (1.16) иногда называют вторым законом Вина.



На рис. 1.3 приведены графики функции $f(\lambda, T) = r$ для АЧТ для двух различных температур $(T_2 > T_1)$. Выражения (1.14) и (1.16) позволяют объяснить ход этих кривых: т.к. $T_2 > T_1$, то $\lambda_{m2} < \lambda_{m1}$, а $r_{m2} > r_{m1}$.

Для экспериментальных зависимостей такого

типа было получено хорошее совпадение с формулой Планка. Это свидетельствует о верности квантовых представлений о природе теплового излучения.

1.2. Внешний фотоэффект

Внешний фотоэффект - это явление освобождения электронов из вещества под действием света.

Для исследования фотоэффекта используют установку, схема которой приведена на рис. 1.4. Катод K и анод A помещены в баллон E, из которого откачан воздух. Свет падает на катод через окошко из кварцевого стекла, пропускающего ультрафиолетовые лучи. При освещении катода из него вылетают электроны, которые под действием электрического поля напряжённостью \vec{E} движутся от катода к аноду. Возникающий при этом в цепи фототок измеряется гальванометром G. Изменяя напряжение U между катодом и анодом, можно получить вольтамперную характеристику (рис. 1.5) – зависимость фототока I от анодного напряжения U при постоянном световом потоке.

Рассмотрим ход вольтамперной характеристики (рис. 1.5). Как видно из графика, при U=0 в цепи течет небольшой ток $I \neq 0$. Это объясняется тем, что электроны вылетают из катода с различными скоростями, и только наиболее быстрые из них достигают анода. Вблизи катода при этом образуется электронное облако, в котором электроны движутся хаотически. При увеличении положи-



тельного напряжения U>0 (когда на рис. 1.4 минус источника тока подключен к катоду, а плюс к аноду) ток растёт, т.к. все больше электронов под действием электрического поля достигают анода. При некотором напряжении фототок достигает насыщения - все испущенные катодом электроны достигают анода (І_н – сила тока насыщения) и электронное облако полностью рассасывается. При дальнейшем увеличении напряжения фототок остается постоянным. Если изменить полярность подключения источника тока на рис. 1.4, т.е. подать отрицательное напряжение U<0 (плюс на катод, минус на анод), то электрическое поле будет препятствовать движению электронов от катода к аноду. Задерживающим напряжением U₃ называют такое минимальное отрицательное анодное напряжение, при котором даже самые быстрые электроны не достигают анода и фототок равен нулю. Задерживающее напряжение позволяет определить максимальную скорость υ_m вылетающих из катода электронов:

$$eU_3 = \frac{m\upsilon_m^2}{2}, \qquad (1.17)$$

где е и m – заряд и масса электрона. В этом выражении eU₃ – работа электрического поля между катодом и анодом, которая идёт на уменьшение до нуля максимальной кинетической энергии $\frac{m\upsilon_m^2}{2}$ электронов.

В результате экспериментальных исследований явления фотоэффекта было установлено, что максимальная скорость электронов зависит от частоты света и не зависит от его интенсивности. Согласно же классическим представлениям с увеличением интенсивности падающего света скорость электронов должна возрастать. Все закономерности фотоэффекта объясния Эйнштейн на основе гипотезы световых квантов: падающий свет представляет собой поток фотонов; при поглощении фотона его энергия $\varepsilon = hv$ полностью передаётся одному электрону в металле. Если эта энергия достаточна, чтобы освободить электрон от удерживающих его связей, то он может выйти из металла. Поэтому закон сохранения энергии для явления фотоэффекта можно записать в виде соотношения:

$$h\nu = A + \frac{m\upsilon_m^2}{2}, \qquad (1.18)$$

которое называется уравнением Эйнштейна для фотоэффекта и означает, что энергия падаюшего фотона hv расходуется на совершение работы выхода А и сообщение электрону максимальной

кинетической энергии $\frac{mv_m^2}{2}$. Однако часть этой энергии электроны могут потерять в результате столкновений в веществе (если электрон освобождается на некоторой глубине), поэтому не все испущенные электроны имеют максимальную энергию.

Работой выхода А электрона из металла называется минимальная энергия, которую нужно сообщить электрону для выхода из металла. Ее величина зависит от типа металла, состояния его поверхности и для некоторых металлов приводится в таблицах.

Квантовые представления о свете и уравнение Эйнштейна позволили объяснить закономерности фотоэффекта, которые первоначально были получены опытным путем:

1) сила тока насыщения прямо пропорциональна световому потоку ($I_{H} \sim \Phi$), т.к. чем больше падает фотонов (больше Φ), тем больше вылетает электронов и, следовательно, увеличивается ток насыщения;

2) непосредственно из уравнения Эйнштейна (1.18) видно, что максимальная кинетическая энергия вылетающих электронов прямо пропорциональна частоте *v* падающего света;

3) существование красной границы фотоэффекта: для каждого металла существует минимальная частота v_{min} и соответствующая ей максимальная длина волны $\lambda_{max} = c / v_{min}$, при которой возможен фотоэффект. При этой частоте или длине волны вся энергия фотона затрачивается на совершение работы выхода, а кинетическая энергия вылетающих электронов равна нулю:

$$hv_{min} = \frac{hc}{\lambda_{max}} = A. . \tag{1.19}$$

Следовательно, частота и длина волны, соответствующие красной границе фотоэффекта, связаны с работой выхода соотношениями:

$$\boldsymbol{v}_{min} = \frac{A}{h} \times \lambda_{max} = \frac{hc}{A} \,. \tag{1.20}$$

Очевидно, что при $v < v_{min}$ и $\lambda > \lambda_{max}$ фотоэффект не наблюдается.

1.3. Корпускулярно-волновой дуализм света. Фотоны

Обобщая известные свойства света, можно сделать вывод, что в явлениях интерференции, дифракции и поляризации свет ведёт себя как электромагнитная волна, а в явлениях фотоэффекта и теплового излучения - как поток частиц - фотонов. Корпускулярноволновым дуализмом называется сочетание светом свойств электромагнитной волны и потока частиц (дуализм - двойственность). Следовательно, свет – это сложное явление, которое в одних случаях ведёт себя как электромагнитная волна, а в других - как поток частиц - фотонов.

Энергия фотона (1.9) определяется его частотой v или длиной волны λ : $\varepsilon = hv = \frac{hc}{\lambda}$. В некоторых случаях удобно выражать

энергию фотона через циклическую частоту $\omega = 2\pi v$. Выразим отсюда v и подставим в ε : $\varepsilon = \frac{h\omega}{2\pi} = \hbar \omega$, где

 $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \, \text{Дж-с}$ - постоянная Планка с чертой. Следовательно, энергия фотона может быть найдена по любой из следующих трех формул:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{h}\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{h}\boldsymbol{c}}{\boldsymbol{\lambda}} = \boldsymbol{h}\boldsymbol{\omega} \,. \tag{1.21}$$

Фотон является релятивистской частицей с нулевой массой, поэтому согласно теории относительности связь его энергии и импульса описывается соотношением: $\varepsilon = pc$ откуда **импульс** фотона:

$$p = \frac{\varepsilon}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}, \qquad (1.22)$$

где $k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$ - волновое число (модуль волнового вектора). Вектор импульса фотона \vec{p} может быть выражен через волновой

вектор \vec{k} , направленный по направлению движения фотона и равный по величине волновому числу:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \tag{1.23}$$

Фотоны всегда движутся со скоростью света: $c = 3 \cdot 10^8$ м/с. Однако из волновой оптики известно, что скорость света в среде меньше чем в вакууме. Это кажущееся противоречие объясняется тем, что при прохождении через вещество фотоны поглощаются атомами вещества, а затем снова испускаются, на что затрачивается некоторое время. Но между актами поглощения и испускания фотоны движутся со скоростью *с*. В результате средняя скорость прохождения фотонами вещества, которую называют скоростью света в веществе, становится меньше *с*, совпадая по величине со скоростью света *U* в веществе.

1.4. Эффект Комптона

Квантовые свойства света проявляются в эффекте Комптона, который состоит в увеличении длины волны рентгеновских лучей при их рассеянии на электронах. Схема опыта Комптона приведена на рис. 1.6. Узкий пучок рентгеновского излучения с длиной волны λ направляется на рассеивающее вещество (PB). В результате взаимодействия излучения с веществом происходит отклонение рентгеновских лучей от первоначального направления на различные



Рис. 1.6

углы $0 < \theta \le 180^{\circ}$. Комптон обнаружил, что в рассеянном излучении наряду с излучением первоначальной длины волны λ содержатся также лучи больших длин волн λ' , а изменение длины

волны $\Delta \lambda = \lambda' - \lambda$ зависит только от угла рассеяния θ .

Увеличение длины волны при эффекте Комптона можно объяснить квантовой природой излучения. Рентгеновский фотон с длиной волны λ упруго соударяется со слабо связанным электроном вещества и передает ему часть своей энергии. В результате энергия фотона уменьшается, а длина волны λ' увеличивается (см. формулу 1.21).

При эффекте Комптона выполняются законы сохранения энергии и импульса:

$$\begin{cases} \varepsilon_{\phi} + E_{oe} = \varepsilon'_{\phi} + E_{e}, \\ \vec{p}_{\phi} = \vec{p}'_{\phi} + \vec{p}_{e}, \end{cases}$$
(1.24)

где $\varepsilon_{\phi} = \frac{hc}{\lambda}$ и $\varepsilon'_{\phi} = \frac{hc}{\lambda'}$ - энергия фотона до и после рассеяния;

$$E_{oe} = mc^2$$
 - энергия покоя электрона, $E_e = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ и

$$\vec{p}_e = \frac{m\upsilon}{\sqrt{1 - \frac{\upsilon^2}{c^2}}}$$
 - полная энергия и релятивистский импульс электро-

на после рассеяния на нем фотона, $p_{\phi} = \frac{h}{\lambda}$ и $p'_{\phi} = \frac{h}{\lambda'}$ - импульс

фотона до и после рассеяния.

Геометрическая интерпретация закона сохранения импульса (1.24) для случая столкновения рентгеновского фотона с первоначально покоившимся электроном приведена на рис. 1.7. В скалярной форме этот закон можно записать, используя теорему косинусов:

$$p_e^2 = p_{\phi}^2 + {p'_{\phi}}^2 - 2p_{\phi}p'_{\phi}\cos\theta$$
. Тогда си

стему уравнений (1.24) можно записать как:

$$\begin{cases} \varepsilon_{\phi} + E_{oe} = \varepsilon'_{\phi} + E_{e}, \\ p_{e}^{2} = p_{\phi}^{2} + p_{\phi}^{\prime 2} - 2p_{\phi}p_{\phi}^{\prime}\cos\theta. \end{cases}$$





Подставляя в эту систему выражения для энергий и импульсов частиц, получим:

$$\begin{vmatrix} \frac{hc}{\lambda} + mc^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{\nu^2}{c^2}}}, \\ \frac{m^2 \nu^2}{1 - \frac{\nu^2}{c^2}} = \frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} \cos \theta. \end{aligned}$$
(1.25)

Исключая из (1.25) скорость υ электронов, можно доказать, что:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta). \tag{1.26}$$

Величина $\lambda_c = \frac{h}{mc}$ называется комптоновской длиной волны. Тогда выражение (1.26) для изменения $\Delta \lambda$ длины волны рентгеновских лучей при эффекте Комптона можно записать в виде: $\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta).$ (1.27)

Для рассеяния на электронах подстановка значений *h*, *c* и *m* дает значение $\lambda_c = 2,43 \cdot 10^{-12} \, \text{м} = 2,43 \, \text{nm}$. Из формулы (1.27) видно, что изменение $\Delta \lambda$ длины волны рассеянного излучения зависит только от угла рассеяния θ , а λ' всегда больше чем λ . Результаты опытов Комптона находятся в полном соответствии с формулой (1.27).

2. Квантовая механика

2.1. Гипотеза и формула де Бройля

При изучении оптических явлений было установлено, что свету присущ корпускулярно-волновой дуализм: свет обладает свойствами волны и частицы. В 1924г. де Бройль выдвинул гипотезу, что частицы вещества наряду с корпускулярными имеют и волновые свойства. Другими словами, корпускулярно-волновой дуализм имеет место для всех микрообъектов. Микрообъект (электрон, атом, молекула и т.п.) представляет собой образование особого рода, сочетающее в себе свойства волны и частицы. Де Бройль предположил, что для микрообъекта справедливы те же формулы энергии и импульса, что и для фотона:

$$E = hv = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda}; \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$
 (2.1)

Таким образом, движение микрообъекта связано с волновым процессом, длина волны и циклическая частота которого соответственно равны:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} \,, \tag{2.2}$$

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{\boldsymbol{E}}{\hbar} \,. \tag{2.3}$$

Длину волны λ , рассчитанную по формуле (2.2), называют дебройлевской длиной волны или длиной волны де Бройля микрочастицы. Соотношения (2.2) и (2.3) связывают корпускулярные (*E*, *p*) и волновые (λ , ω) характеристики микрообъекта и отражают его корпускулярно-волновой дуализм.

Для нерелятивистской частицы, движущейся со скоростью υ много меньшей скорости света $c (\upsilon << c)$: $p = m\upsilon$ и в соответствии с (2.2)

$$\lambda = \frac{h}{m\upsilon}.$$
 (2.4)

В релятивистском случае (когда скорость частицы близка к с)

импульс
$$p = \frac{m\upsilon}{\sqrt{1 - \frac{\upsilon^2}{c^2}}}$$
 и формула (2.2) принимает вид:

$$\lambda = \frac{h\sqrt{1 - \frac{\upsilon^2}{c^2}}}{m\upsilon}.$$
(2.5)

Вскоре гипотеза де Бройля была подтверждена экспериментально: были проведены опыты по дифракции электронов. Один из них (опыт Томсона) состоял в том, что пучок электронов пропускался через тонкую металлическую фольгу и попадал на фотопластинку. При этом происходила дифракция электронного пучка на межатомных промежутках, а на фотопластинке наблюдалась типичная дифракционная картина (рис. 2.1). Причём дифракция происходила при периодическом пропускании через фольгу даже отдельных частиц (например, одного электрона в минуту). Дифракционные явления были также обнаружены у атомных и молекулярных пучков.



Рис. 2.1

2.2. Соотношение неопределённостей

Состояние частицы в классической механике задаётся её координатами, проекциями импульса, энергией и т.п. Причем все эти величины имеют определенные значения, а движение частицы происходит по точной траектории. Т.к. микрообъекты обладают волновыми свойствами, то к ним неприменимы законы классической механики, а их состояние нельзя описывать вышеперечисленными величинами. Волна распространяется в некоторой области пространства, поэтому говорить о траектории волны не имеет смысла. Поэтому понятие траектории к микрообъектам не применимо. Эти соображения привели к **принципу неопределённости**. Согласно этому принципу существуют пары физических величин, точные значения которых невозможно определить одновременно. Математическим выражением этого принципа служит соотношение неопределённостей Гейзенберга, в котором неопределённости координат и проекций импульса микрообъекта связаны соотношениями:

$$\begin{cases} \Delta x \cdot \Delta p_x \ge \hbar, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \ge \hbar, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \ge \hbar, \end{cases}$$
(2.6)

где Δx - неопределённость координаты x микрообъекта, Δp_x неопределённость проекции p_x импульса на ось x и т.д. Соотношение неопределенностей (2.6) означает, что для микрообъекта произведение неопределённости координаты на неопределённость соответствующей проекции импульса больше или равно постоянной Планка \hbar . Таким образом, микрообъект занимает объем пространства с координатами от x до $x + \Delta x$, от y до $y + \Delta y$, от z до $z + \Delta z$ и имеет при этом проекции импульса от p_x до $p_x + \Delta p_x$, от p_y до $p_y + \Delta p_y$, от p_z до $p_z + \Delta p_z$. Из соотношения неопределённостей следует, что чем точнее определена одна величина (меньше её неопределённость), тем больше неопределённость другой. В частности, если координата x частицы имеет точное значение и, следовательно, неопределенность координаты $\Delta x = 0$, то из (2.6) получаем: $\Delta p_x \ge \frac{\hbar}{\Delta x} \rightarrow \infty$, т.е., импульс частицы полностью не определён и может иметь любое значение.

Для энергии *E* микрообъекта и времени *t* также справедливо соотношение неопределённостей:

$$\Delta E \cdot \Delta t \ge \hbar \,, \tag{2.7}$$

где ΔE - неопределённость энергии частицы в состоянии с энергией E; Δt - время существования частицы в состоянии с энергией E.

2.3. Волновая функция

Так как в соответствии с соотношением неопределенностей (2.6) микрообъект не имеет определенных значений координат и проекций импульса, то невозможно указать его точное местонахождение в пространстве. Оказалось, что движение микрообъекта носит

вероятностный характер и можно определить лишь вероятность нахождения частицы в данном месте пространства. Поэтому законы классической механики неприменимы к описанию движения микрочастиц. Эту задачу решает квантовая механика - науки о движении микрочастиц. В квантовой механике состояние микрочастицы описывается волновой функцией Ψ (пси-функцией), которая зависит от координат и времени:

$$\Psi = \Psi(x, y, z, t). \qquad (2.8)$$

Для свободной частицы, движущейся в положительном направлении оси *x*, волновая функция имеет вид:

$$\Psi = A\cos(\omega t - \kappa x), \qquad (2.9)$$

где $\kappa = \frac{2\pi}{\lambda}$ - волновое число (модуль волнового вектора), λ - дебройлевская длина волны (2.2) частицы, A – амплитуда волны де Бройля. Выражение (2.9) означает, что свободной частице соответствует плоская волна де Бройля.

В общем случае волновая функция может быть комплексной, поэтому сама она физического смысла не имеет. Физический смысл имеет квадрат модуля волновой функции:

$$\left|\boldsymbol{\Psi}\right|^{2} = \boldsymbol{\Psi} \cdot \boldsymbol{\Psi}^{*}, \qquad (2.10)$$

где Ψ^* - функция комплексно-сопряжённая к Ψ . В математике комплексное число z = a + ib, где $i = \sqrt{-1}$ - мнимая единица. Число, комплексно-сопряжённое числу *z*, обозначается $z^* = a - ib$; а квадрат модуля комплексного числа $|z|^2 = z \cdot z^* = a^2 + b^2$.

Пусть частица находится в пространстве объёмом V. Тогда вероятность нахождения частицы в бесконечно малом объёме dV этого пространства ищется по формуле:

$$dP = \left|\Psi\right|^2 dV \ . \tag{2.11}$$

Из (2.11) следует физический смысл волновой функции:

$$\left|\Psi\right|^2 = \frac{dP}{dV}.$$
 (2.12)

Он состоит в том, что квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности нахождения частицы в данном месте пространства. Плотностью вероятности $\frac{dP}{dV}$ называется вероят-

ность нахождения частицы в единице объёма. Вероятность нахождения частицы в части ΔV объема V:

$$\boldsymbol{P} = \int_{\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{V}} \left| \boldsymbol{\Psi} \right|^2 d\boldsymbol{V} \,. \tag{2.13}$$

Из математики известно, что вероятность может принимать значения $0 \le P \le 1$. Если, например, вероятность P = 0,2, то это означает, что частица 20% времени находится в объёме ΔV , а 80% в остальном объёме пространства V. Если точно известно, что частица находится в объёме V, то это - достоверное событие и его вероятность P = 1. Подставив это значение P в (2.13), получим условие нормировки волновой функции:

$$\int_{V} \left| \boldsymbol{\mathcal{Y}} \right|^2 dV = \mathbf{1} \,, \tag{2.14}$$

где *V*.- весь объем, в котором может находиться частица. Условие (2.14) используют для нахождения амплитуды волновой функции.

Из физического смысла волновой функции следует, что волновая функция должна быть конечной, однозначной и непрерывной. Эти требования называются **стандартным условиями**.

2.4. Уравнение Шрёдингера для стационарного состояния

Основным уравнением квантовой механики является уравнение Шрёдингера, которое позволяет найти волновую функцию частицы, если известна потенциальная энергия U частицы во внешнем силовом поле. Наиболее просто уравнение Шрёдингера записывается для **стационарного состояния**, *в котором потенциальная энергия зависит только от координат и не зависит от времени*: U = U(x,y,z). Можно показать, что в стационарном состоянии плотность вероятности не зависит от времени и для ее нахождения достаточно знать координатную часть волновой функции $\Psi = \Psi(x, y, z)$. Ее можно найти, решив **уравнение Шрёдингера для стационарного состояния:**

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E - U) \cdot \Psi = 0 \quad , \qquad (2.15)$$

где *m* - масса частицы, *U* – потенциальная энергия частицы во

внешнем силовом поле, *E* – полная энергия частицы, ΔΨ - оператор Лапласа от волновой функции:

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}$$
(2.16)

Уравнение Шрёдингера (2.15) с точки зрения математики представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных. В теории дифференциальных уравнений доказывается, что уравнения такого типа имеют решения не при любых значениях энергии Е, а лишь при некоторых избранных значениях. Если движение частицы не ограничено в пространстве (свободная частица), то энергия Е может принимать непрерывный ряд значений в некотором интервале. Это совпадает с представлениями классической физики. Однако если движение частицы ограничено в пространстве (электрон в атоме, в металле и т.п.), то из уравнения Шредингера следует, что энергия Е частицы может принимать только ряд допустимых значений E₁, E₂,..., E_n. Cootветствующие этим значениям энергии волновые функции также будут принимать ряд дискретных значений $\Psi_1, \Psi_2, ..., \Psi_n$, описывающих различные квантовые состояния частицы. Таким образом, из уравнения Шрёдингера непосредственно вытекает квантование энергии частицы: энергия частицы во внешнем силовом поле может принимать дискретных только ряд значений $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$

2.5. Частица в потенциальной яме (ящике)

Движение частицы в ограниченном объеме - это движение частицы в потенциальной яме. Наиболее простым для описания является одномерное движение частицы в потенциальной яме ограниченной ширины, из которой частица не может выйти ни при каких условиях.

Предположим, что частица может двигаться только вдоль оси x, а её движение ограничено непроницаемыми стенками с координатами x = 0 и $x = \ell$. В этом случае потенциальная энергия U частицы имеет следующий вид (рис. 2.2): U = 0 при $0 < x < \ell$, $U = \infty$ при x < 0 и $x > \ell$.



Одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямой называется область пространства $0 < x < \ell$, внутри которой потенциальная энергия частицы равна нулю, а за ее пределами обращается в бесконечность.

Так как в данном случае волновая функция зависит только от координаты *x* частицы, то в соответствии с (2.16) $\Delta \psi = \frac{d^2 \psi}{dx^2}$, а уравнение Шредингера (2.15) принимает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0.$$
 (2.17)

Так как за пределами потенциальной ямы частица находиться не может, то вероятность обнаружить ее в областях x < 0 и $x > \ell$ равна нулю. Следовательно, в этих областях волновая функция $\Psi = 0$.

Внутри потенциальной ямы U = 0. Подставив это значение в (2.17), получим уравнение Шредингера для частицы в потенциальной яме:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0. \qquad (2.18)$$

Введём обозначение $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. (2.19)

Тогда (2.18) можно записать в форме:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0.$$
 (2.20)

Это однородное дифференциальное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами. Его решение имеет вид:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) . \tag{2.21}$$

Из условия непрерывности волновой функции следует, она должна равняться нулю на границах ямы, т. к. за пределами ямы $\psi = 0$. Следовательно, $\psi(0) = 0$ и $\psi(\ell) = 0$. Подставляя в (2.21) x=0 и $\psi(0) = 0$, получим: $\psi(0) = A\sin(k \cdot 0 + \alpha) = 0$. Откуда следует: $A\sin\alpha = 0$, $\sin\alpha = 0$ и $\alpha = 0$. С учетом этого (2.21) принимает вид: $\psi(x) = A\sin kx$. (2.22)

Подставим в (2.22) $x = \ell$ и $\psi(\ell) = 0$: $\psi(\ell) = A \sin k\ell = 0$. Следовательно:

$$\sin k\ell = 0, a \quad k\ell = \pi n, \qquad (2.23)$$

где n = 1,2,3...- целые числа (n = 0 не подходит по физическому смыслу, так как при этом получается, что k = 0 и $\psi(x) = 0$, т.е. частицы в яме нет). Выразим k из (2.23) и подставим в (2.19):

$$k = \frac{\pi n}{\ell} , \qquad (2.24)$$

$$\frac{\pi^2 n^2}{\ell^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$
 (2.25)

Откуда находим возможные значения полной энергии частицы в потенциальной яме:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m\ell^2} (n = 1, 2, 3, ...).$$
(2.26)

Таким образом, полная энергия частицы в яме может принимать только ряд дискретных значений: $E_1, E_2, E_3, ...$ Наименьшее значение энергии будет в состоянии с n = 1, которое называется основным состоянием: $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2}$. Тогда энергию в n – ном

состоянии можно выразить через энергию основного состояния:

$$E_n = E_1 n^2$$
 ($E_n > E_1$). (2.27)



На рис. 2.3 приведена схема энергетических уровней для частицы в потенциальной яме, построенная в соответствии с формулой (2.27). На этой схеме $E_2 = 4E_1, E_3 = 9E_1$ и т.д. (уровни с n > 3 также существуют, но на схеме не показаны). Из (2.27) и рис. 2.3 видно, что с увеличением номера уровня энергия E_n возрастает. Разность энергий соседних уровней: $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = E_1(n+1)^2 - E_1n^2 = E_1(2n+1)$

также увеличивается с ростом *n*.

Подставив (2.24) в (2.22), получим, что волновая функция

$$\Psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{\ell} \,. \tag{2.28}$$

Амплитуду A волновой функции можно найти из условия нормировки (2.14), которое для одномерного движения (частица может двигаться только вдоль оси x) принимает вид:

$$\int |\psi|^2 dx = 1.$$
 (2.29)

Подставляя (2.28) в (2.29), получим: $A^2 \int_{0}^{\ell} \sin^2 \frac{\pi nx}{\ell} dx = 1.$ (2.30)

Интеграл в левой части выражения (2.30) равен $\frac{\ell}{2}$. С учетом этого (2.30) принимает вид: $A^2 \frac{\ell}{2} = 1$. Откуда находим $A = \sqrt{\frac{2}{\ell}}$ и подставляем в (2.28). В результате получим, что волновая функция для частицы в потенциальной яме имеет вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{\pi n x}{\ell}, \qquad (2.31)$$

$$n=1,2,3,\ldots$$
 (2.32)

На рис. 2.4 приведены графики волновой функции: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{\pi n x}{\ell}$ (а) и квадрата модуля волновой функции: $|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{\ell} \sin^2 \frac{n \pi x}{\ell}$ (б) для трех первых возможных состояний

$$(n=1, 2, 3)$$
, в которых $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{\pi x}{\ell}$, $\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin \frac{2\pi x}{\ell}$ и т.д. Из
графика видно, что плотность вероятности $|\psi|^2$ обнаружения

графика видно, что плотность вероятности $|\psi|$ оонаружения частицы различна на разных расстояниях от стенок ямы. Например, при n = 2 частица не может находиться в середине ямы $(x = \ell/2)$, а вероятность её обнаружения вблизи точек с координатами $x = \ell/4$ и $x = 3\ell/4$ максимальна.



Рис. 2.4

2.6. Прохождение частиц через потенциальный барьер

Рассмотрим движение частицы вдоль оси x, когда на ее пути встречается потенциальный барьер прямоугольной формы (рис. 2.5). Для такого барьера высоты U_0 и ширины l потенциальная энергия U частицы имеет следующие значения:



$$U = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ U_0, & 0 \le x \le l \\ 0, & x > l \end{cases}$$

Согласно законам классической механики частица с энергиейпройдет через барьер и будет двигаться в первоначальном направлении, а частица с $E < U_0$ отразится от барьера и полетит в обратную сторону.

С точки зрения квантовой теории существует вероятность того, что частица с энергией $E > U_0$ отразится от барьера, а частица с $E < U_0$ проникнет за барьер. Это следует из решения уравнения Шредингера при условиях данной задачи. Коэффициентом прозрачности *D* барьера называется *вероятность того, что частица окажется за барьером*. В случае прямоугольного барьера, изображенного на рис. 2.5, коэффициент прозрачности может быть выражен приближенной формулой:

$$D \cong exp\left(-\frac{l}{\hbar}\sqrt{8m(U_0-E)}\right).$$
(2.33)

Из выражения (2.35) следует, что D зависит от массы m частицы, ширины l барьера и разности энергий ($U_0 - E$); чем шире и выше барьер, тем меньше вероятность прохождения через него частицы.

Явление прохождения частицы через потенциальный барьер, высота которого больше энергии частицы, называют «туннельным эффектом». С классической точки зрения это невозможно, так как в области барьера кинетическая энергия частицы должна быть отрицательна. Разъяснить это противоречие можно на основе соотношения неопределенностей: поскольку координата и импульс частицы не имеют одновременно определеных значений, то не могут быть одновременно точно определены кинетическая E_k и потенциальная U энергии частицы. Поэтому полная энергия E частицы не может быть представлена в виде суммы точно определенных значений E_k и U. Следовательно, в квантовой механике деление энергии на кинетическую и потенциальную лишено смысла.

Таким образом, туннельный эффект является специфически квантовым явлением. Оно было обнаружено экспериментально и позволило объяснить ряд физических явлений (автоэлектронная эмиссия, контактные явления в полупроводниках и др.).

2.7. Квантовый осциллятор

Гармонический осциллятор – это частица, совершающая колебания под действием квазиупругой силы F = -kx, где k - коэффициент квазиупругой силы. Потенциальная энергия такой частицы $U = \frac{kx^2}{2}$. Циклическая частота колебаний гармонического осциллятора $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, где m – масса частицы. Следовательно, $k = m\omega^2$, и выражение для потенциальной энергии принимает вид: $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$.

Так как колебания осциллятора одномерные (вдоль оси *x*), то оператор Лапласа от волновой функции $\Delta \psi = \frac{d^2 \psi}{dx^2}$. Поэтому из (2.15) с учетом (2.34) получаем **уравнение Шрёдингера** для квантового осциллятора:



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

 $\int_{E_1}^{E_2} (2.35)$ $\xrightarrow{(2.35)}$ $\xrightarrow{(2.35)}$ $\xrightarrow{(2.35)}$ $\xrightarrow{(2.35)}$ $\xrightarrow{(2.36)}$ $\xrightarrow{(2.36)}$ $\xrightarrow{(2.36)}$ $\xrightarrow{(2.36)}$ $\xrightarrow{(2.36)}$ $\xrightarrow{(2.36)}$

Из (2.36) видно, что полная энергия осциллятора квантуется, т.е. принимает ряд дискретных значений:

^(2.34)

 $E_0, E_1, E_2,...$ Наименьшее ее возможное значение $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ называется нулевой энергией. Ее существование связано с тем, что при T = 0К колебания атомов кристаллической решётки не прекращаются. Здесь имеет место различие представлений квантовой и классической физики, согласно которой E=0 при T = 0К.

На рис. 2.6 приведены график потенциальной энергии (парабола $U = \frac{kx^2}{2}$) и соответствующая формуле (2.36) схема энергетических уровней квантового осциллятора, на которой показаны первые из возможных значений энергии: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$, $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$, $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ и

 $E_3 = \frac{7}{2} \hbar \omega$. Видно, что уровни отстоят друг от друга на одинаковом расстоянии равном **разности энергий соседних уровней:**

$$\Delta E_n = \hbar \boldsymbol{\omega} , \qquad (2.37)$$

T.K.
$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = (n+1+\frac{1}{2})\hbar\omega - (n+\frac{1}{2})\hbar\omega = \hbar\omega$$

Расчет вероятности переходов из одного квантового состояния в другое показывает, что для осциллятора возможны лишь переходы между соседними уровнями. При таких переходах квантовое число *n* изменяется на единицу. Условия, накладываемые на кантовые числа при переходе системы из одного квантового состояния в другое, называются правилами отбора. **Правило отбора для квантового осциллятора**:

$$\Delta n = \pm 1 . \tag{2.38}$$

2.8. Уравнение Шрёдингера для атома водорода. Энергия электрона в атоме водорода

Простейшим атомом является атом водорода, состоящий из протона (ядро атома) и движущегося вокруг ядра электрона. Электрон находится в электростатическом поле ядра, поэтому его потенциальная энергия $U = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}$, где $q_1 = +e$ заряд протона, $q_2 = -e$ -

заряд электрона, r – расстояние от ядра до электрона, ε_0 - электрическая постоянная. С учетом этих обозначений потенциальная энергия электрона в атоме водорода $U = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$. Подставляя последнее выражение в (2.15), получим **уравнение Шрёдингера для электрона** в атоме водорода (т.е. для атома водорода):

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}) \psi = 0, \qquad (2.39)$$

где ψ – волновая функция, описывающая состояние электрона в атоме водорода; *m* – масса электрона, *e* – элементарный заряд.

Решения этого уравнения удовлетворяют стандартным условиям и описывают движение электрона в атоме водорода при отрицательных дискретных значениях энергии

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \qquad (n=1, 2, 3, ...).$$
(2.40)

Первый сомножитель в выражении (2.40) состоит из физических констант. Обозначив его E_i и подставив в него значения констант, получим:

$$E_i = \frac{me^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = 2,18 \cdot 10^{-18} \, \text{Дж} = 13,63B \,. \tag{2.41}$$

$$E_n = -\frac{E_i}{n^2}.$$
 (2.42)

где $E_i = 13,69B$ - энергия ионизации (ее физический смысл будет разъяснен позже), n = 1, 2, 3, ...- главное квантовое число. Формула (2.42) показывает, что в зависимости значений *n* энергия стационарных состояний атома водорода E_n может принимать только ряд дискретных значений, т.е. квантуется. Знак минус означает, что электрон находится в связанном состоянии.

Подставляя в (2.42) *n* = 1, 2, 3, ..., найдем возможные значения энергии атома водорода:



Рис. 2.7 схеме энергетических уровней (рис. 2.7), где показаны первые из возможных значений энергии. Видно, что возможным значениям энергии атома водорода на рис. 2.7 соответствует ряд энергетических уровней, между которыми находятся запрещенные значения энергии.

Энергия $E_{\infty} = 0$ при $n = \infty$ соответствует электрону, покинувшему атом. Энергией ионизации называется минимальная энергия, которую нужно сообщить атому, чтобы оторвать от него электрон. Этому процессу соответствует переход электрона из основного состояния (n = 1) на уровень $n = \infty$ с изменением энергии от $E_1 = -13,69B$ до $E_{\infty} = 0$. Поэтому в соответствии с законом сохранения энергии $E_i = E_{\infty} - E_1 = 0 - E_1 = -13,69B$. Следовательно, энергия ионизации атома водорода $E_i = 13,69B$ (если атом первоначально находился в основном состоянии). При сообщении атому, находящемуся в основном состоянии, энергии $E_{\infty} = E_{\infty} - E_{0} = 0$.

 $E > E_i$, освободившийся электрон будет иметь ещё и кинетическую энергию $E_{\kappa} = E + E_1$

2.9. Излучение и поглощение энергии атомом. Формула Бальмера-Ридберга

Атом может переходить из одного стационарного состояния в другое. При переходе атома из состояния с меньшей энергией в состояние с большей энергией он поглощает энергию: $\Delta E = E_m - E_n$, (m > n). Такую энергию атом может получить за счёт поглощения фотона, либо при столкновении с электроном.

При переходе атома из состояния с большей энергией в состо-

яние с меньшей энергией атом испускает фотон с энергией:

$$E_{\phi} = h v = \frac{hc}{\lambda} = \hbar \omega = E_m - E_n \qquad (m > n). \qquad (2.43)$$

Основным называется состояние с наименьшей энергией E_I . В этом состоянии атом может находиться сколь угодно долго, т.к. в соответствии с принципом минимума энергии любая система стремится находиться в состоянии с наименьшей энергией. Возбуждённым называется состояние с энергией больше E_I ($E_n > E_I$, n = 2,3,4...). В возбуждённом состоянии атом может находиться короткое время, порядка 10^{-8} с, а затем переходит в одно из возможных состояний с меньшей энергией, испустив фотон.

Найдем длину волны λ электромагнитного излучения, испускаемого атомом водорода при переходе с *m*-ого на *n*-ый уровень (*m* >

n). Энергии, соответствующие этим уровням, $E_m = -\frac{E_i}{m^2}$ и

$$E_n = -\frac{E_i}{n^2}$$
 (см. 2.42). Подставим эти выражения в (2.43):
 $\frac{hc}{\lambda} = -\frac{E_i}{m^2} + \frac{E_i}{n^2}$. Вынесем за скобки E_i и разделим на hc :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_i}{hc} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Обозначив $R = \frac{E_i}{hc} = \frac{2,18 \cdot 10^{-18}}{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8} = 1,1 \cdot 10^7 \, \text{m}^{-1}$,

приходим к формуле Бальмера-Ридберга:

$$\frac{1}{\lambda} = R(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}) \qquad (m > n), \qquad (2.44)$$

где $R = 1,1 \cdot 10^7 \, m^{-1}$ - постоянная Ридберга, λ - длина волны фотона, испускаемого при переходе с *m*-ого на *n*-ный уровень.

В соответствии с (2.44) спектр излучения атома водорода состоит из отдельных спектральных линий. Спектральной серией называется совокупность переходов на общий нижний уровень. На рис. 2.8 показаны три первые спектральные серии атома водорода. Серия Лаймана объединяет спектральные линии, испускаемые при переходе на уровень n = 1. Она лежит в ультрафиолетовой области спектра ($\lambda < 0,4$ мкм), для этой серии формула (2.40) принимает вид:



$$\frac{1}{\lambda} = R(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{m^2})$$
,где $n = 1$, $m = 2,3,4...$

Длины волн, соответствующие серии Бальмера, можно найти по формуле

$$\frac{1}{\lambda} = R(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2})$$
, где $n = 2, m = 3, 4, 5...$

Первые 4-е линии этой серии лежат в видимой части спектра

 $(0,4 < \lambda < 0,76$ мкм).

Инфракрасной области спектра ($\lambda > 0,76$ *мкм*) соответствует серия Пашена, для которой

$$\frac{1}{\lambda} = R(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{m^2})$$
, где $n = 3, m = 4,5,6...$

2.10. Квантовые числа. Квантование момента импульса

Выражение для волновой функции, описывающей состояние электрона в атоме водорода, находят путем решения соответствующего уравнения Шредингера (2.39). Полученная при этом волновая функция ψ содержит **три целочисленных параметра** *n*, ℓ и *m*.

Параметр n – главное квантовое число, которое может принимать значения n = 1, 2, 3..., совпадает с номером энергетического уровня и определяет энергию электрона в атоме водорода по формулам (2.40, 2.42).

Параметр ℓ - орбитальное (азимутальное, побочное) квантовое число, которое может иметь значения $\ell = 0, 1, 2, ..., n - 1$ и определяет модуль орбитального момента импульса электрона в атоме водорода:

$$\boldsymbol{L} = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} \ . \tag{2.45}$$

Ограничения на возможные значения ℓ ($\ell \le n-1$) возникают при решении уравнения Шредингера для атома водорода. Поэтому при данном *n* квантовое число ℓ может принимать только *n* различных значений. Формула (2.45) означает квантование модуля орбитального момента импульса электрона в атоме водорода. Следует отметить, что квантование *L* согласно формуле (2.45) присуще всем частицам при любых условиях, при этом $\ell = 0, 1, 2, ...$ (ограничения на наибольшее значение ℓ не всегда существуют). Для системы из нескольких частиц (молекула) момент импульса системы равен сумме моментов отдельных частиц. (Напомним, что момент импульса частицы в классической механике равен векторному произведению радиус-вектора \vec{r} частицы на ее импульс \vec{p} : $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$).

Параметр *m* - магнитное квантовое число, которое может принимать значения $m = -\ell, -\ell + 1, ..., -1, 0, +1, ..., \ell - 1, \ell$ (всего $2\ell + 1$ различных значений) и определяет проекцию орбитального момента импульса электрона на ось z:

$$\boldsymbol{L}_{\boldsymbol{Z}} = \boldsymbol{m}\boldsymbol{\hbar} \,. \tag{2.46}$$

Формула (2.46) означает квантование проекции момента импульса электрона в атоме водорода, которое также имеет место для всех частиц. Ограничения на наибольшее значение m связано с тем, что проекция вектора не может быть больше его модуля.

Таким образом, в атоме водорода квантуются энергия, модуль и проекция орбитального момента импульса электрона.

2.11. Спин электрона. Правило отбора. Фермионы и бозоны. Принцип Паули

Кроме момента импульса, обусловленного движением электрона вокруг ядра, электрон обладает собственным моментом импульса, не связанным с движением в пространстве. Спин – *собственный момент импульса электрона*, является его внутренним свойством, таким как заряд или масса. Вначале предполагалось, что спин обусловлен вращением электрона вокруг своей оси (spin – вращение). Вскоре от этих представлений отказались. В настоящее время считается, что спин является квантовым и релятивистским свойством электрона.

Модуль спина определяется по формуле, аналогичной (2.45):

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)} , \qquad (2.47)$$

где *s* - спиновое квантовое число. В частности для электрона спиновое квантовое число равно $s = \frac{1}{2}$ Таким образом, для элек-

трона $L_s = \frac{\sqrt{3}\hbar}{2}$.

Возможные значения проекции спина на ось z находят по формуле, подобной (2.46):

$$\boldsymbol{L}_{sz} = \boldsymbol{m}_s \boldsymbol{h} \,, \tag{2.48}$$

где \mathbf{m}_{s} - магнитное спиновое квантовое число (или просто спиновое число): $m_{s} = -s, -s + 1, ..., s - 1, s$

Так как электрона s=1/2 то $m_s = \pm \frac{1}{2}$ и проекция спина имеет

всего два возможных значения: $L_{sz} = \pm \frac{1}{2}\hbar$.

Спином обладают и другие частицы (протоны, нейтроны, фотоны), а также атомы и молекулы. В частности для фотона s = 1, $L_s = \hbar\sqrt{2}$. При переходе электрона в атоме с уровня на уровень происходит испускание и поглощение фотонов. При этом вследствие закона сохранения момента импульса, должен меняться и момент импульса атома, следовательно, и квантовое число ℓ . В квантовой механике показывается, что для орбитального квантового числа выполняется **правило отбора**: $\Delta \ell = \pm 1$, т.е. при переходах электрона в атоме с уровня на уровня с испусканием или поглощение фотонов орбитальное квантовое число может изменяться только на единицу.

Частицы с полуцелым спином (электроны, протоны, нейтроны) называются фермионами. Они могут находиться в квантовых состояниях только «поодиночке». Фермионы подчиняются принципу Паули: в системе одинаковых фермионов в данном квантовом состоянии может находиться только один фермион.

Частицы с целым или нулевым спином называются бозонами. Бозоны не подчиняются принципу Паули. В пределах данной системы в одном квантовом состоянии может находиться неограниченное число бозонов.

Сложные частицы (атомные ядра, атомы, молекулы), составленные из нечетного числа фермионов, являются фермионами (их суммарный спин полуцелый), а из четного – бозонами (суммарный спин целый).

2.12. Характеристики состояния электрона в атоме. Периодическая система элементов

Состояние электрона в любом атоме, также как и в атоме водорода, можно характеризовать четырьмя квантовыми числами:

главным
$$n$$
 ($n = 1, 2, 3...$) (2.49)

орбитальным ℓ ($\ell = 0, 1, 2, ..., n-1$) (2.50)

магнитным
$$m$$
 ($m = 0, \pm 1, ..., \pm \ell$) (2.51)

спиновым
$$m_s$$
 $(m_s = \pm \frac{1}{2})$ (2.52)

Согласно **принципу Паули** в любой системе в *данном квантовом состоянии может находиться только один электрон*. Следовательно, в атоме не может быть двух (и более) электронов характеризующихся одним и тем же набором четырёх квантовых чисел.

Энергия атома зависит, главным образом, от квантовых чисел *n* и ℓ (в атоме водорода только от *n*). Причем при одном и том же значении энергии атом может находиться в нескольких состояниях, отличающихся квантовыми числами ℓ, m, m_s . Найдем, сколько состояний *z* может иметь атом при одном и том же значении *n*. Т.к. при данном ℓ магнитное квантовое число *m* (2.51) принимает значения $m = 0,\pm 1,\pm 2...,\pm \ell$, т.е. $(2\ell+1)$ различных значений, а само число ℓ (2.50) изменяется от 0 до (n-1), то с учетом двух возможных ориентаций спина (2.52) число различных значений при данном *n*, можно найти суммированием всех возможных значений остальных

квантовых чисел: $z = 2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2n^2$. Таким образом, число

возможных состояний атома при данном значении главного квантового числа *n*:

$$z = 2n^2$$
. (2.53)

Выражение (2.53) означает, что в состоянии с данным значением n могут находиться в атоме не более $2n^2$ электронов. Например, в состоянии с n=1 может быть максимум 2 электрона, с n=2 – 8 электронов и т.д.

Электроны, имеющие одинаковое значение главного квантового числа, образуют электронную оболочку. Ниже приведены обозначения оболочек в зависимости от значения *n* :

l	0	1	2	3	
Обозначение подоболочки	S	р	d	f	

В каждой из оболочек электроны распределяются по **подобо**лочкам, отличающихся квантовым числом ℓ :

п	1	2	3	4	
Обозначение оболочки	Κ	L	М	Ν	••••

В соответствии с этими обозначениями электрон, находящийся в состоянии с $\ell = 0$, называют s-электроном, а соответствующее состояние s-состоянием и т.д. Значение главного квантового числа обычно указывают перед обозначением числа ℓ . Так электрон в состоянии с n = 3 и $\ell = 1$ обозначают 3р. Подразделение возможных состояний электронов в атоме на оболочки и подоболочки наглядно представлена в виде таблицы (2.1), которая может быть продолжена далее для M, N и последующих оболочек.

	Гаолица 2.1						
Обозна- чение оболочки	п	l	т	m _s	Обозначе- ние состояния	Число состояний в подоболочке	Число состоя- ний в оболочке
K	1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	1s	2	2
L	2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2s	2	
			-1	$\pm \frac{1}{2}$			8
		1	0	$\pm \frac{1}{2}$	2p	6	
			1	$\pm \frac{1}{2}$			

Принцип Паули, на котором основано заполнение электронных оболочек атомов, позволяет объяснить **Периодическую систему** элементов Д.И. Менделеева. Химические элементы в периодической системе расположены по мере возрастания их порядкового номера Z, равного числу протонов в ядре и соответственно числу электронов в электронной оболочке. Химические свойства элементов, обусловленные внешними (валентными) электронами атома, в таблице Менделеева периодически повторяются, что обусловлено определенной повторяемостью в заполнении электронных оболочек. Для объяснения Периодической системы будем считать, каждый последующий элемент образован из предыдущего прибавлением одного протона к ядру и одного электрона в электронную оболочку. Этот электрон будем помещать в доступное ему согласно принципу Паули состояние с наименьшей энергией (см. табл. 1). Начнем с атома водорода (Z=1), в котором имеется 1 электрон в состоянии 1s, которое характеризуется квантовыми числами n=1, l=0, m=0 и $m_s = \pm 1/2$ (ориентация спина произвольная).

Если заряд ядра атома водорода увеличить на единицу и добавить еще один электрон, то получится атом гелия (Z=2). Оба электрона атома *He* находятся в состоянии 1*s*, но с антипараллельной ориентацией спинов. Электронная конфигурация этого атома 1s². На атоме гелия заканчивается заполнение *K*-оболочки, что соответствует завершению I периода периодической системы.

Третий электрон атома лития (Z=3), согласно принципу Паули, не может находиться в полностью заполненной *K*-оболочке и занимает состояние с наименьшей энергией в *L*-оболочке, т.е. состояние 2s. Этот электрон слабо связан с ядром, является валентным, чем и объясняются особые свойства щелочных металлов. Электронная конфигурация атома *Li*: $1s^22s^1$. Атом *Li* начинает II период таблицы Менделеева. Следующий элемент бериллий (Z=4) имеет полностью заполненную подоболочку 2s. У последующих шести элементов от *B* (Z=5) до *Ne* (Z=10) идет заполнение подоболочки 2p. II период заканчивается неоном, у которого все оболочки полностью заполнены, образуя устойчивую систему, подобную системе гелия, чем и обусловлены специфические свойства инертных газов.

Одиннадцатый элемент Na (Z=11) имеет полностью заполненные K и L – оболочки и один электрон в состоянии 3s в M-оболочке. Этот электрон слабо связан с ядром и является валентным, поэтому натрий подобно литию является щелочным металлом. Электронная конфигурация натрия $1s^22s^22p^63s^1$. У некоторых следующих за натрием элементов имеет место нарушение последовательности заполнения оболочек. Однако во всех случаях периодически повторяющиеся электронные конфигурации верхних уровней обуславливают периодическую повторяемость химических и оптических свойств атомов.
3. Элементы квантовой статистики

3.1. Термодинамический и статистический методы описания состояния системы. Химический потенциал

Макросистема представляет собой систему (коллектив), состоящую из огромного числа микрочастиц (атомов, молекул или элементарных частиц). Для описания состояния такой системы используют два метода: термодинамический и статистический.

Термодинамика изучает свойства макроскопических тел, не рассматривая их микроскопическую природу. Состояние термодинамической системы задается параметрами состояния, характеризующими систему в целом. Основные из них это: объем системы V, давление p, температура T. Функциями состояния системы являются внутренняя энергия U и энтропия S. В основе термодинамики лежат несколько фундаментальных законов (начал термодинамики). Согласно первому началу термодинамики

$$dQ = dU + dA, \qquad (3.1)$$

где dQ - количество теплоты, сообщённое системе, dU – приращение внутренней энергии системы, dA - работа, совершенная системой. Учитывая, что работа равна dA = pdV, первое начало термодинамики можно записать в виде: dQ = dU + pdV или

$$dU = dQ - pdV. (3.2)$$

Выражение (3.2) означает, что внутренняя энергия системы может изменяться за счет передачи тепла и совершения работы. Однако внутренняя энергия системы может изменяться и за счет изменения числа N частиц в ней. Если число частиц увеличится на dN, то каждая частица внесет в систему некоторую энергию. Поэтому выражение (3.2) в общем виде нужно записать следующим образом:

$$dU = dQ - pdV + \mu dN , \qquad (3.3)$$

Параметр μ называется химическим потенциалом системы. Для теплоизолированной системы (Q=0) постоянного объема (dA=pdV=0) соотношение (3.3) принимает вид: $dU = \mu dN$. Откуда получаем определение химического потенциала:

$$\mu = \frac{\partial U}{\partial N}, \qquad (3.4)$$

Формула (3.4) выражает физический смысл химического потенциала: химический потенциал µ равен изменению энергии теплоизолированной системы постоянного объема при изменении в ней числа частиц на единицу.

3.2. Принцип тождественности. Фермионы и бозоны. Вырожденные и невырожденные коллективы частиц

В квантовой механике *частицы одинаковой природы неразличимы между собой* – в этом заключается **принцип тождественности одинаковых микрочастиц**. С этой точки зрения, например, все электроны совершенно одинаковы и от их перестановки местами состояние системы не изменится.

Фермионами называются частицы с полуцелочисленным спином $s = \frac{1}{2}$, $s = \frac{3}{2}$ и т.п. К ним относятся электроны, протоны, ряд других элементарных частиц, а также атомы и молекулы, суммарный спин которых удовлетворяет этому условию. Для системы фермионов справедлив **принцип Паули:** *в данном квантовом состоянии может находиться только один фермион*.

Бозонами называются частицы с нулевым и целочисленным спином s = 0, s = 1 и т.п. К ним относятся фотоны (s = 1) и ряд других элементарных частиц, а также атомы и молекулы с целым спином. Бозоны не подчиняются принципу Паули и могут в одном и том же состоянии находиться в неограниченном количестве. В частности при T = 0 К все бозоны находятся в состоянии с наименьшей энергией.

Рассмотрим систему из N одинаковых микрочастиц, каждая из которых может находиться в состояниях с энергиями $E_1, E_2,...$, составляющими дискретный ряд значений. Пусть на N частиц приходится Z возможных состояний. Отношение $\frac{N}{Z}$ показывает среднее число частиц, приходящихся на одно квантовое состояние. Коллектив частиц является вырожденным, если число N частиц одного порядка с числом Z квантовых состояний: $N \approx Z$, $\frac{N}{Z} \approx 1$. В этом случае при заполнении состояний частицами в полной мере проявляется специфика фермионов и бозонов: фермионы заполняют

состояния поодиночке, а бозоны – коллективно. Поэтому свойства коллективов фермионов и бозонов оказываются различными.

Коллектив частиц является невырожденным, если число N ча-

стиц гораздо меньше числа Z квантовых состояний: $N \ll Z$, $\frac{N}{Z} \ll 1$.

В этом случае при заполнении уровней каждая частица может занять одно из множества возможных состояний, специфика фермионов и бозонов не проявляется, а свойства коллективов фермионов и бозонов в целом будут аналогичны. В классической физике энергия частиц принимает непрерывный ряд значений, поэтому число Z состояний бесконечно, а $\frac{N}{Z} << 1$, как и для невырожденного коллектива частиц. Поэтому поведение невырожденного коллектива подчиняется законам классической статистики.

Одной из задач статистической физики является нахождение закона распределения частиц по квантовым состояниям. Для невырожденного коллектива частиц эти законы для фермионов и бозонов одинаковы, их изучением занимается классическая статистика. Для вырожденных коллективов фермионов и бозонов законы распределения различны, их изучением занимается квантовая статистика. Если уменьшить число частиц в системе или увеличить число возможных состояний, то вырожденный коллектив станет невырожденным и будет описываться классической статистикой.

3.3. Число частиц в элементарном интервале энергий

Как отмечалось выше, задачей статистической физики является нахождение закона распределения частиц по квантовым состояниям. Будем задавать состояние каждой частицы системы значением её энергии E. Если на элементарный интервал энергий от E до E+dE приходится dZ(E) состояний, а в каждом состоянии в среднем находится f(E) частиц, то число частиц dN(E), имеющих энергию в этом интервале, определяется выражением:

$$dN(E) = f(E) \cdot dZ(E), \qquad (3.5)$$

где dN(E) - число частиц с энергией от E до E+dE; dZ(E) – число состояний, приходящихся на интервал от E до E+dE, f(E) - функция распределения частиц по состояниям, равная среднему числу частиц, находящихся в состоянии с энергией E. Например, если на 100 близко расположенных уровней приходится в среднем 10

частиц, то f(E) = 10/100 = 0,1. Для фермионов f(E) также определяет вероятность заполнения фермионом состояния с энергией E. Это следует из того, что для фермионов максимальное значение функции распределение равно единице (см. ниже). Поэтому среднее число частиц в состоянии с энергией Е и вероятность заполнения состояния для фермионов понятия тождественные.

Выражение (3.5) показывает, что для нахождения закона распределения частиц по энергиям нужно знать явный вид функций f(E) и dZ(E). Если он известен, то, проинтегрировав выражение (3.5), можно найти число частиц N, имеющих энергию в интервале от E_1 до E_2 :

$$N = \int_{E_1}^{E_2} f(E) \cdot dZ(E) \, .$$

3.4. Функции распределения Ферми-Дирака, Бозе-Эйнштейна и Максвелла-Больцмана

Систему невзаимодействующих (свободных) частиц называют газом частиц. *Распределение по состояниям частиц газа фермионов описывается* функцией распределения Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1},$$
 (3.6)

где *E* – полная энергия частицы; μ - химический потенциал (3.4); *k* – постоянная Больцмана; *T* – термодинамическая температура, *e*=2,71– экспонента.

Газ бозонов подчиняется распределению Бозе-Эйнштейна и описывается функцией распределения Бозе-Эйнштейна:

$$f(E) = \frac{1}{\frac{E - \mu}{e^{\frac{E}{kT}} - 1}}.$$
 (3.7)

Для невырожденных коллективов фермионов и бозонов $\frac{N}{Z} << 1$ и среднее число частиц в одном квантовом состоянии f(E) << 1. Для выполнения этого условия необходимо, чтобы знаменатель дроби в формулах (3.6) и (3.7) был много больше единицы: $e^{\frac{E-\mu}{kT}} \pm 1 >> 1$. Но тогда единицей в знаменателе этих

выражений можно пренебречь и записать функции распределения в следующем виде:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}}} = e^{\frac{\mu-E}{kT}}$$
. Преобразовав показатель экспоненты в

данной формуле, получаем функцию распределения Максвелла-Больцмана, описывающую распределение по состояниям частиц невырожденного газа:

$$f(E) = e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} .$$
(3.8)

3.5. Число состояний в элементарном интервале импульсов

Рассмотрим систему из N микрочастиц. В классической механике состояние каждой частицы системы можно задать шестью величинами: координатами x, y, z и проекциями импульса p_x , p_y , p_z частицы. Фазовым пространством называется воображаемое шестимерное пространство с осями координат x, y, z, p_x , p_y , p_z . Состоянию классической частицы соответствует точка фазового пространства. Наличие у микрочастиц волновых свойств приводит к тому, что состоянию частицы соответствует не точка, а некоторый объем фазового пространства. Оценим этот объем, используя соотношение неопределенностей:

$$\Delta x \Delta p_x \ge h, \ \Delta y \Delta p_y \ge h \ \Delta z \Delta p_z \ge h, \tag{3.9}$$

где Δx , Δy , Δz , Δp_x , Δp_y , Δp_z - неопределенности координат и проекций импульса, h – постоянная Планка. Перемножим левые и правые части всех трех неравенств (3.9):

$$\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \ge h^3.$$
(3.10)

Выражение в левой части $\Delta\Gamma = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$ представляет собой элемент объема фазового пространства, причем согласно (3.10) $\Delta\Gamma \geq h^3$. Отсюда следует, что различным элементам объема $\Delta\Gamma$ будут соответствовать различные квантовые состояния, если размер этих элементов больше или равен h^3 . При этом наименьший объем фазового пространства, соответствующий одному квантовому состоянию,

$$\Delta \Gamma = h^3 \tag{3.11}$$

принимается за ячейку шестимерного фазового пространства. Тогда все фазовое пространство можно разделить на ячейки объемом h^3 , соответствующие различным квантовым состояниям.

Состояние каждой частицы системы обычно задается энергией *E* или модулем *p* импульса частицы. В последнем случае фазовое пространство удобно разбить на два подпространства: пространство координат с осями *x*, *y*, *z* и пространство импульсов с осями проекций импульса p_x , p_y , p_z . Обозначим $\Delta\Gamma_v = \Delta x \Delta y \Delta z$ - элемент объёма подпространства координат и $\Delta\Gamma_p = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$ - элемент объёма подпространства импульсов. С учетом введенных обозначений выражение (3.11) можно записать в виде:

$$\Delta \Gamma_V \Delta \Gamma_p = h^3 \,. \tag{3.12}$$

Для системы свободных частиц $\Delta\Gamma_V = V$ - объему, в котором движутся частицы, так как никаких других ограничений на координаты частиц не налагается. В этом случае равенство (3.12) принимает вид: $\Delta\Gamma = V \cdot \Delta\Gamma_p = h^3$. Отсюда находим, что объём подпространства импульсов, соответствующий одному квантовому состоянию равен:

$$\Delta \Gamma_p = \frac{h^3}{V} \,. \tag{3.13}$$

Найдем объём $d\Gamma_p$ подпространства импульсов с импульсами в интервале от *p* до *p*+d*p*. Для этого в подпространстве импульсов проведем две сферы радиусами *p* и *p*+d*p* (рис. 3.1). Объем $d\Gamma_p$ шарового слоя между двумя сферами равен произведению площади



Рис. 3.1

сферы $4\pi p^2$ на толщину dp слоя: $d\Gamma_p = 4\pi p^2 dp$. (3.14)

Тогда число dZ(p) квантовых состояний в шаровом слое можно найти, разделив объем шарового слоя $d\Gamma_p$ (3.14) на объем, соответствующий одному состоянию, $\Delta\Gamma_p$ (3.13):

$$dZ(p) = \frac{d\Gamma_p}{\Delta\Gamma_p}$$
или

$$dZ(p) = \frac{4\pi V p^2 dp}{h^3} \qquad (3.15)$$

Здесь dZ(p) - число квантовых состояний, приходящихся на элементарный интервал импульсов (от *p* до *p*+*dp*) для газа свободных частиц.

3.6. Число состояний в элементарном интервале энергий

Для нахождения числа dZ(E) состояний свободных частиц в элементарном интервале энергий (от *E* до *E* + *dE*) воспользуемся связью между энергией и импульсом частицы. Эта связь различна для частиц с нулевой и ненулевой массой.

Для частиц с ненулевой массой ($m \neq 0$) в нерелятивистском случае импульс p=mv (v – скорость частицы), а полная механическая энергия E в отсутствие внешнего поля и взаимодействия между частицами равна кинетической E_k : $E = E_k = \frac{mv^2}{2}$. Чтобы выразить энергию через импульс, умножим числитель и знаменатель этой формулы на массу m:

$$E = \frac{m^2 \upsilon^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}.$$

Таким образом, связь энергии E и импульса p для свободных частиц с $m \neq 0$ имеет вид:

$$E = \frac{p^2}{2m} \,. \tag{3.16}$$

Формулу для dZ(E) можно получить заменой переменных в выражении (3.15): $dZ(p) = \frac{4\pi V p^2 dp}{h^3}$. С этой целью найдем из (3.16), что

$$p^2=2mE, \ p=\sqrt{2mE}$$
. Тогда дифференциал импульса

$$dp = p'dE = \left(\sqrt{2mE}\right)' dE = \left(2m\right)^{1/2} \left(E^{1/2}\right)' dE = \left(2m\right)^{1/2} \cdot \frac{1}{2} E^{-1/2} dE \cdot (3.17)$$

Здесь p' - производная от импульса p по энергии E. Подставим $p^2=2mE$ и (3.17) в (3.15):

$$dZ(E) = \frac{4\pi V \cdot 2mE \cdot \frac{1}{2} (2m)^{1/2} E^{-1/2} dE}{h^3}.$$

Откуда после преобразований получим, что **число состояний в** элементарном интервале энергий для свободных частиц с $m \neq 0$:

$$dZ(E) = \frac{2\pi V (2m)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE}{h^3} .$$
 (3.18)

При этом для электронов число состояний (3.18) необходимо увеличить в два раза, так как данную энергию *E* могут иметь два электрона с противоположными спинами. Поэтому для свободных электронов **число состояний в элементарном интервале энергий**

$$dZ(E) = \frac{4\pi V(2m)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE}{h^3} .$$
 (3.19)

Для частиц с нулевой массой (m=0) связь энергии и импульса имеет вид E = pc. Откуда находим, что $p = \frac{E}{c}$, $dp = \frac{dE}{c}$. Подставляя эти соотношения в (3.15), получим выражения для числа dZ(E) состояний в элементарном интервале энергий для частиц с m=0:

$$dZ(E) = \frac{4\pi V E^2 dE}{h^3 c^3}.$$
 (3.20)

4. Зонная теория твердых тел

4.1. Энергетические зоны в кристаллах. Металлы, полупроводники и диэлектрики с точки зрения зонной теории

В изолированном атоме электроны имеют дискретный ряд разрешенных значений энергии, которым на энергетической схеме соответствует набор энергетических уровней. При этом разрешенные уровни энергии электронов разделены областями запрещенных значений энергии. На рис. 4.1а показана схема энергетических уровней атома натрия, находящегося в основном состоянии. Рассмотрим сначала уровень 1s. Этому уровню соответствуют два квантовых состояния электрона, отличающиеся ориентацией спина. Согласно принципу Паули в одном квантовом состоянии не может находиться более одного электрона. Поэтому на уровне 1s в каждом атоме находится два электрона. При сближении N изолированных атомов возможно туннелирование электронов уровня 1s одного атома на уровень 1s другого атома. Но в таком случае на уровне 1s окажется более 2-х электронов, что запрещено принципом Паули. Поэтому уровни 1s каждого из двух атомов расщепляются на два и становятся



общими для этих атомов. Аналогичные изменения происходят с уровнями 1s остальных атомов - одинаковый лля всех N атомов уровень 1s расщепляется на *N* очень близких, но не совпадающих уровней, т. е. образуется энергетическая зона разрешенных значений энергии. состоящая из N близко расположенных уровней. При объединении в кристалл любого количества атомов аналогичное явление расщепление уровней и образование разрешенных энергетических 30H происходит не только с

уровнем 1*s*, но и со всеми другими энергетическими уровнями (рис. 4.16), в том числе и с уровнями не занятыми электронами (например, 3p). Разрешенные энергетические зоны разделены областями (зонами) запрещенных значений энергии (рис. 4.16). Ширина зон составляет несколько электрон-вольт и не зависит от размеров кристалла. Количество энергетических уровней в каждой зоне разрешенных значений энергии очень велико – порядка числа атомов в кристалле. Поэтому энергетические уровни в разрешенных зонах расположены очень близко друг к другу. Каждому уровню в разрешенной зоне соответствуют два квантовых состояния электрона, отличающиеся ориентациями спина (п. 3.6), и, следовательно, согласно принципу Паули, на каждом уровне не может быть более двух электронов.

Таким образом, схема энергетических уровней электронов изолированного атома представляет собой ряд энергетических уровней, разделенных областями запрещенных значений энергии (рис. 4.1а), тогда как **схема энергетических уровней электронов в кристалле** *представляет собой ряд разрешенных и запрещенных зон* (рис. 4.1б).

Из полностью заполненных уровней атома (на рис 4.1 это уровни 1s, 2s, 2p) образуются полностью заполненные зоны – зоны, на каждом уровне которой находится два электрона, отличающиеся направлением спина. Из частично заполненных уровней (уровень 3s на рис.4.1) образуются частично заполненные зоны. Частично заполненныя зона может образоваться и за счет перекрытия полно-



Обозначения: СЗ - свободная зона; ВЗ - валентная зона; ЗЗ - запрещенная зона; Ед - ширина запрещенной зоны Рис. 4.2 стью заполненной зоны с пустой зоны, расположенной ней. над Разрешенную зону. возникшую уровня из валентных электронов 4.1)(3s на рис. называют валентной зоной.

Из сказанного выше следует, что верхняя содержащая электроны зона может быть заполнена либо частично (рис.4.2а), либо полностью (рис.4.2б). Ниже этой зоны расположены

полностью заполненные зоны и их не изображают на схемах. Над верхней заполненной зоной расположена свободная (пустая) зона. Над ней также находятся свободные зоны, которые не изображают, т.к. они не влияют на электрические свойства тел.

С помощью зонной теории можно объяснить деление твердых тел по величине их электропроводности. (Уточним, что речь идет об электронной электропроводности, когда носителями тока являются электроны. Кроме электронной электропроводности существует ионная, при которой носители тока - ионы, например, в электролитах или, в твердых телах при достаточно высокой температуре).

Электрический ток возникает под действием внешнего электрического поля, которое изменяет скорости, а, следовательно, и кинетическую энергии электронов. На зонной схеме этому соответствует переход электронов на свободные уровни внутри зоны. Если разрешенная энергетическая зона заполнена целиком, т. е. в ней отсутствуют свободные квантовые состояния – на всех уровнях по два электрона, то такие переходы не возможны, т. к. они приводят к нарушению принципа Паули. С другой стороны энергии электрического поля недостаточно для перевода электронов из заполненной в свободную зону. Следовательно, электроны целиком заполненных зон не могут принимать участия в электропроводности (Именно по этой причине на рис.4.2 нижние полностью заполненные зоны не изображают). В зоне, частично заполненной электронами, свободные состояния имеются. Следовательно, под действием электрического поля электроны могут изменять свою энергию и переходить на свободные энергетические уровни, а, значит, и участвовать в электропроводности. Таким образом, проводниками электрического тока являются вещества, у которых имеется зона, частично заполненная электронами.

Зонная схема проводника показана на рис.4.3а. На этой схеме валентная зона заполнена частично; следовательно, твердое тело с такой зонной схемой – это проводник. *Разрешенную зону, в которой находятся электроны, участвующие в электропроводности называют* зоной проводимости. Таким образом, у проводника валентная зона одновременно является и зоной проводимости. При этом свободная и запрещенная зоны для электропроводности проводника не существенны. На рис. 4.3а приведена зонная схема проводника при *T*=0K. В этом случае электроны занимают состояния с наименьшей энергией с учетом принципа Паули. При повышении температуры проводника или помещении его в электрическое поле энергия электронов увеличивается, и они переходят на более высокие свободные энергетические уровни.





Типичными проводниками являются металлы. В металлах валентные электроны атомов обобществлены, т. е. теряют связь с отдельными атомами и принадлежат всем атомам металла. Положительно заряженные ионы (атомы, потерявшие свои валентные электроны) образуют кристаллическую решетку металла. Обобществленные электроны хаотически перемещаются по всему объему металла, и их можно рассматривать как электронный газ в металле. Именно возможные значения энергии этих электронов показаны на зонной схеме металла. Количество электронов в зоне проводимости (количество валентных электронов) в металле представляет собой величину того же порядка, что и количество атомов в кристалле. Поэтому концентрация электронов проводимости в металле велика (10²⁸-10²⁹ м⁻³) и практически не зависит от температуры.

Диэлектрики (изоляторы) это вещества, которые при любой температуре не проводят электрический ток (нет электронной проводимости). Следовательно, зонная схема диэлектрика должна иметь вид, показанный на рис.4.36. Валентная зона заполнена полностью – электроны не могут изменять энергию под действием электрического поля и поэтому не участвуют в электропроводности; в свободной зоне нет электронов (нет электронов с энергией уровней свободной зоны). Ширина E_g запрещенной зоны диэлектрика велика, поэтому тепловое движение не может перевести из валентной в свободную зону заметное число электронов (т.е. увеличение энергии электронов за счет теплового движения недостаточно, чтобы энергия электронов стала равна энергии уровней свободной зоны).

Зонная схема полупроводника (рис.4.3в) при T=0К такая же как у диэлектрика (рис.4.3б), но ширина E_g запрещенной зоны меньше. Таким образом, при T=0К валентная зона полупроводника полностью заполнена электронами, а над ней находится свободная зона. Если при T=0К поместить полупроводник в электрическое поле, то энергии поля будет недостаточно для перевода электронов из валентной в свободную зону. Поэтому при T=0К полупроводники не проводят электрический ток.

При повышении температуры часть электронов валентной зоны приобретает энергию, достаточную для перехода в свободную зону - увеличение энергии электронов за счет теплового движения достаточно, чтобы энергия электронов стала равна энергии уровней свободной зоны. Следовательно, при повышении температуры некоторые электроны преодолевают запрещенную зону и переходят в свободную, которая одновременно является и зоной проводимости полупроводника. Это приводит к появлению в зоне проводимости свободных электронов, а в валентной зоне – свободных уровней. При приложении электрического поля электроны, находящиеся в зоне проводимости и валентной зоне, под действием сил поля будут изменять свою энергию, и переходить на не полностью заполненные уровни в соответствующих зонах. Т.е. полупроводник будет проводить электрический ток. Чем меньше ширина запрещенной зоны E_{σ} и выше температура, тем больше электронов переходит из валентной зоны в зону проводимости и тем выше электропроводность.

Из сказанного следует, что принципиальной разницы в зонных схемах диэлектрика и полупроводника нет. Если ширина зоны большая, то при обычных температурах (порядка комнатной) переходов из валентной в свободную зону мало, соответственно идет малый ток – практически это диэлектрик. При небольшой ширине зоны ток достаточно существенный - это полупроводник. Принято считать, что при $E_g < 1 \div 2$ эВ вещество является полупроводником, при $E_g > 3$ эВ – диэлектриком.

4.2. Электронный газ в металле. Функция Ферми-Дирака для электронного газа в металле

Как отмечалось выше, в металле валентные электроны атомов обобществлены, т. е. теряют связь с отдельными атомами и принадлежат всем атомам металла. Положительно заряженные ионы (атомы, потерявшие свои валентные электроны) образуют кристаллическую решетку металла. Обобществленные электроны (их называют свободными электронами) хаотически перемещаются по всему объему металла и их можно рассматривать как электронный газ в металле. У электронов спиновое квантовое число *s*=1/2. Следовательно, электроны относятся к классу фермионов и подчиняются принципу Паули: в каждом квантовом состоянии не может быть больше одного фермиона. Поэтому в зоне проводимости металла (рис.4.3а) каждому энергетическому уровню свободных электронов, соответствует два квантовых состояния, отличающихся ориентацией спина электрона. Число свободных электронов в металле сравнимо с числом состояний (удвоенным числом энергетических уровней в зоне проводимости). Поэтому электронный газ в металле вырожденный (п. 3.2) и описывается статистикой Ферми-Дирака (§3.4). Согласно этой статистике среднее число электронов в одном квантовом состоянии с энергией Е (вероятность заполнения электронами квантового состояния с энергией Е) определяется функцией Ферми-Дирака (3.6):

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1},$$
 (4.1)

где E – кинетическая энергия электрона, μ - химический потенциал (3.4) электронного газа, k – постоянная Больцмана, T – термодинамическая температура, e=2,71 – основание натурального логарифма. Вследствие принципа Паули f(E) не может быть больше единицы и принимает значения в пределах от 0 до 1.

Рассмотрим заполнение зоны проводимости свободными электронами металла при температуре T=0K. В этом случае для значений энергии $E<\mu$ экспонента в знаменателе формулы (4.1) при $T\rightarrow 0$ с

учетом *E*-
$$\mu$$
<0 равна: $e^{\frac{E-\mu}{kT}} = e^{-\infty} = \frac{1}{e^{\infty}} = 0$. Подставляя это значение

в (4.1), получим: $f(E) = \frac{1}{0+1} = 1$. Для значений энергии $E > \mu$ при

T \rightarrow 0 с учетом *E*- μ >0 получим для экспоненты $e^{\frac{E-\mu}{kT}} = e^{\infty} = \infty$. Подставляя это значение в (4.1), находим: $f(E) = \frac{1}{\infty + 1} = 0$. Таким образом при **T** = **0** K:

$$f(E) = \begin{cases} 1 & E < \mu \\ 0 & E > \mu \end{cases}$$
(4.2)

На рис.4.4 показан график функции f(E) распределения Ферми-Дирака при абсолютном нуле, построенный в соответствии с выражением (4.2). Он имеет вид ступеньки, обрывающейся при $E=\mu$. Таким образом, при T=0К вероятность заполнения электронами квантовых состояний с энергиями $E<\mu$ равна единице, вероятность заполнения состояний с энергиями $E>\mu$ равна нулю. Максимальную кинетическую энергию свободных электронов в металле при T=0К называют энергией Ферми (обозначают E_F), а соответствующий ей энергетический уровень – уровнем Ферми. Так как при T=0К заполнены электронами только те уровни, энергия которых не превышает μ , то энергия Ферми равна химическому потенциалу (рис.4.4a): $\mu=E_F$.



Рис. 4.4

На рис. 4.46 для T=0К в соответствии с функцией Ферми-Дирака приведена схема заполнения электронами зоны проводимости металла. На схеме учтено, что каждому значению энергии E соответствуют два квантовых состояния с противоположными ориентациями спина электрона – на всех уровнях с энергиями $E < \mu$ находится по два электрона; все уровни с энергиями $E > \mu$ свободны. Такое заполнение энергетических уровней электронами согласуется с общим принципом физики: при T=0К энергия системы должна быть минимальной, что и выполняется с учетом принципа Паули. Следовательно, кинетическая энергия свободных электронов при *T*=0К не является энергией их теплового движения, а обусловлена принципом Паули, т.е. имеет чисто квантовую природу.

При температуре *T*>0К электронный газ в металле обладает не только энергией, обусловленной принципом Паули, но и энергией теплового движения. На рис.4.5а показан график зависимости



Рис. 4.5

функции f(E) распределения Ферми-Дирака от энергии E электронов при T>0К. Из графика видно, что при T>0К для состояний E<µ функция f(E) < 1; для состояний с энергиями $E > \mu$ функция f(E) > 0. Это связано с тем, что при Т>0К часть электронов за счет теплового движения увеличивает свою энергию, т.е. переходит с уровней, энергия которых $E < \mu$, на уровни с энергиями $E > \mu$ (рис.4.56). Средняя энергия теплового движения пропорциональна kT. Поэтому даже при очень высоких температурах она много меньше энергии уровня химического потенциала μ . Так, для *T*=2000К, что выше температуры плавления большинства металлов, kT=0.17 эВ, тогда как для большинства металлов $\mu = 3 \div 10$ эВ, т. е. отношение $kT/\mu = 0.02 \div 0.06$. Так как $kT << \mu$, то при T>0К изменение энергии происходит только у электронов расположенных вблизи уровня µ, электроны более глубоких уровней не могут увеличить энергию, так как они должны были бы подняться на уровни где уже находятся два электрона, а это запрещено принципом Паули. Следовательно «размытие» ступеньки (см. график f(E) при T=0K) при T>0K очень слабое. Поэтому в металлах можно пренебречь зависимостью химического потенциала μ от температуры и считать, что $\mu \approx E_F$. Так как $\mu \approx E_F$., то часто химический потенциал в металлах и при Т>0К называют энергией Ферми. Из формулы (4.1) следует, что при $E=\mu$ и Т>0К

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} = \frac{1}{e^0 + 1} = \frac{1}{1+1} = \frac{1}{2}$$
 (рис.4.5а). Это означает, что при

Т>0К уровень Ферми заполнен наполовину, т.е. на нем находится один электрон.

4.3. Число свободных электронов и уровень Ферми в металле

Найдём число N свободных электронов в металлическом образце объёмом V при T = 0 К. Для этого воспользуемся соотношением (3.5) $dN(E) = f(E) \cdot dZ(E)$, где dN(E) - число электронов с энергией от E до E + dE, dZ(E) – число состояний в интервале от E до E + dE. Так как при T = 0 К все электроны находятся в состояниях с энергией $E \le E_F$ (рис. 4.4), то, интегрируя это выражение в пределах от 0 до E_F , можно найти общее число свободных электронов в металле:

$$N = \int_{0}^{E_F} f(E) dZ(E) \,. \tag{4.3}$$

Так как согласно (4.2) при T = 0 К и $E \le E_F$ функция распределения f(E)=1 то (4.3) принимает вид:

$$N = \int_{0}^{E_F} dZ(E) \,. \tag{4.4}$$

Подставляя в (4.4) выражение (3.19) для числа энергетических состояний свободных электронов $dZ(E) = \frac{4\pi V (2m)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE}{h^3}$ и вынося постоянные множители за знак интеграла, получаем:

$$N = \frac{4\pi V(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_{0}^{E_F} E^{\frac{1}{2}} dE = \frac{4\pi V(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \frac{2}{3} E^{\frac{3}{2}} \Big|_{0}^{E_F} = \frac{8\pi V(2m)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{3}{2}}_{F}}{3h^3}$$

Таким образом, при T = 0 К общее число свободных электронов в объеме V металла

$$N = \frac{8\pi V (2m)^{\frac{3}{2}} E_F^{\frac{3}{2}}}{3h^3}.$$
 (4.5)

Объёмная концентрация (число частиц в единице объёма) $n = \frac{N}{V}$.

Разделив (4.5) на объем V, найдем концентрация свободных электронов в металле при T = 0 K:

$$n = \frac{8\pi (2m)^{\frac{3}{2}} E_F^{\frac{3}{2}}}{3h^3} .$$
 (4.6)

Выразим из (4.6) энергию Ферми E_F и оценим ее величину.

Для этого возведем (4.6) в степень $\frac{2}{3}$: $n^{\frac{2}{3}} = \left(\frac{8\pi}{3h^3}\right)^{\frac{2}{3}} 2mE_F$. Откуда следует, что

$$E_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}}$$
(4.7)

Концентрация электронов в металле $n = 10^{28} - 10^{29} \, \text{m}^{-3}$. Подставляя в (4.7) среднее значение концентрации $n = 5 \cdot 10^{28} \, \text{m}^{-3}$, получим

$$E_F = \frac{(6.63 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9.31 \cdot 10^{-31}} \cdot \left(\frac{3 \cdot 5 \cdot 10^{28}}{3.14}\right)^3 = 8 \cdot 10^{-19} \, \text{Дж} = 59B$$

Температура Ферми T_F показывает, при какой температуре электронный газ имел бы энергию теплового движения kT, равную энергии Ферми E_F : $kT_F = E_F$. Откуда **температура Ферми**

$$T_F = \frac{E_F}{k}, \qquad (4.8)$$

где k – постоянная Больцмана. Поведение электронного зависит от соотношения между температурой T металла и температурой Ферми T_F , т.к. при повышении температуры электроны переходят на более высокие уровни, то вероятность заполнения уровней уменьшается, и газ из вырожденного может стать невырожденным. Поэтому, если $T \ll T_F$, т.е. $kT \ll E_F$, электронный газ вырожденный. Если $T \gg T_F$, т.е. $kT \gg E_F$, электронный газ невырожденный. Оценим температуру

Ферми для металла: $T_F = \frac{5 \cdot 1, 6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23}} = 64000$ К. При такой высокой

температуре металл в твердом состоянии существовать не может.

55

Таким образом, для металла выполняется соотношение $T \ll T_F$, и электронный газ в металле всегда вырожденный.

При T>0 для определения числа свободных электронов в уравнении (4.3) надо учесть функцию распределения Ферми-Дирака. Но, как было отмечено в п. 4.2, в металлах отличие графика функции Ферми-Дирака при T>0 от функции при T=0К очень незначительное – и при T>0 график этой функции очень близок к «ступеньке». Это значит, что результаты, полученные выше для T=0К, с большой степенью точности можно использовать и для температур отличных от 0К. В частности, это означает, что при повышении температуры незначительно изменяются уровень Ферми и концентрация электронов в металле.

4.4. Средняя энергия электронов в металле при T = 0К

При T = 0 К кинетическая энергия свободных электронов в металле принимает дискретный ряд значений E_1 , E_2 , ..., E_m , заключенных в интервале от нуля до максимальной кинетической энергии $E_m = E_F$ - энергии Ферми. Среднюю энергию электронов можно найти, разделив сумму $\sum E_i$ энергий всех электронов на их число N:

$$\left\langle E\right\rangle = \frac{\sum E_i}{N} \,. \tag{4.9}$$

Сначала найдем сумму энергий dN(E) электронов, имеющих энергию в интервале от E до E + dE. Т.к. этот интервал бесконечно малый, то можно считать, что все dN(E) электронов имеют одинаковую энергию E, поэтому суммарная энергия dN(E) электронов равна $E \cdot dN(E)$. Интегрируя это выражение от нуля до энергии Ферми, получим сумму энергий всех электронов:

$$\sum E_{i} = \int_{0}^{E_{F}} E dN(E) \,. \tag{4.10}$$

При T = 0 К число свободных электронов $N = \int_{0}^{E_{F}} dN(E)$. Подставляя в

(4.9) выражения для N и (4.10), получим формулу для вычисления средней энергии:

$$\left\langle E \right\rangle = \frac{\int\limits_{0}^{E_{F}} EdN(E)}{\int\limits_{0}^{E_{F}} dN(E)},$$
(4.11)

где согласно (3.5) dN(E) = f(E)dZ(E). В соответствии с (4.2) при T = 0 К и $E \le E_F$ функция распределения f(E)=1, поэтому dN(E) = dZ(E). Выражение (3.19) для числа состояний электронов в

элементарном интервале энергий $dZ(E) = \frac{4\pi V(2m)^{3/2} E^{1/2} dE}{h^3}$ удобно записать в виде: $dZ = AE^{1/2} dE$, где постоянная $A = \frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{h^3}$. Тогда $dN(E) = AE^{\frac{1}{2}} dE$. (4.12)

Подставляя (4.12) в (4.11), получим:

$$\langle E \rangle = \frac{ \int_{F}^{E_{F}} EAE^{\frac{1}{2}} dE}{ \int_{0}^{E_{F}} AE^{\frac{1}{2}} dE} = \frac{ A \int_{0}^{E_{F}} E^{\frac{3}{2}} dE}{ A \int_{0}^{E_{F}} E^{\frac{1}{2}} dE} = \frac{ 2 \cdot 3E_{F}^{\frac{5}{2}} }{ 2 \cdot 3E_{F}^{\frac{5}{2}} } = \frac{ 3}{5} E_{F} .$$

Таким образом, при T = 0 К средняя энергия свободных электронов в металле:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F \cdot \tag{4.13}$$

Аналогичным способом можно найти среднее значение любой физической величины a, для которой известен закон распределения dN(a) частиц по значениям этой величины. В этом случае среднее значение величины a находят по формуле, аналогичной (4.11):

$$\langle a \rangle = \frac{\int_{0}^{\infty} a \cdot dN(a)}{\int_{0}^{\infty} dN(a)}$$
(4.14)

4.5. Зонные схемы и модели кристаллических решеток полупроводников

Полупроводниками являются кристаллические вещества, у которых при *T*=0К валентная зона полностью заполнена электропроводности полупроводники занимают промежуточное место между металлами и диэлектриками. К полупроводникам относится целый ряд элементов: германий, кремний, селен, теллур и др., а также и многие химические соединения: арсенид галлия, арсенид индия, карбид кремния и т.п. Полупроводники делятся на *собственные* и *примесные*. Собственные полупроводники это химически чистые полупроводники (не содержащие примесей). В примесных полупроводниках некоторые основные атомы заменяют атомами, валентность которых отличится от валентности основного атома на единицу.

4.5.1. Собственные полупроводники

Типичными собственными полупроводниками являются элементы IV группы периодической системы элементов – германий и кремний, атомы которых имеют по 4 валентных электрона (рис.4.6а). В кристалле каждый такой атом окружен четырьмя соседними атомами и образует с ними ковалентные связи: валентный электрон одного атома «объединяется» с одним из электронов другого атома (рис.4.6.б). При T = 0 К все связи заняты электронами, свободных электронов нет, и полупроводник не проводит электрический ток. Зонная схема при T = 0 К показана на рис. 4.7: в валентной зоне все уровни заняты валентными электронами, осуществляющими ковалентные связи, а в зоне проводимости все уровни свободны, так как нет свободных электронов.



Рис. 4.6

Рис. 4.7

При повышении температуры интенсивность колебаний атомов возрастает. Это приводит к разрыву ковалентной связи и освобождению одного электрона – возникает «свободный» электрон (рис.4.8). В месте, откуда ушел электрон, остается незавершенная связь, т. е. электронная вакансия, и образуется избыточный положительный заряд +е, равный по модулю заряду электрона. Эту положительно заряженную область – электронную вакансию, можно рассматривать как частицу (квазичастицу), которую называют *дыркой*. (Термин "квазичастица" означает, что речь идет не о настоящей частице, а об объекте, который можно рассматривать как частицу). Таким образом, дырка - это положительно заряженная область, которая была занята валентным электроном. Сказанное схематически изображено на рис.4.8. Энергия, которая затрачивается на разрыв связи, равна ширине E_g запрещенной зоны (рис.4.9).



Электроны и дырки в отсутствие электрического поля движутся хаотически, на место дырки может перескакивать электрон из соседних связей, следовательно, дырка может свободно перемещаться по кристаллу. При встрече электрона и дырки они рекомбинируют (соединяются). При этом происходит исчезновение электрона и дырки. Таким образом, в собственном полупроводнике одновременно идут два процесса: рождение пар свободных электронов и дырок и их рекомбинация. Процессу образования пары электронов и дырок и их рекомбинация. Процессу образования пары электронов из валентной зоны в зону проводимости, а рекомбинации – обратный переход. В результате в полупроводнике при данной температуре устанавливается равновесная концентрация электронов и дырок. Чем выше температура, тем больше число разорванных связей, т.е. больше переходов из валентной зоны в зону проводимости, и больше концентрация свободных электронов и дырок.

При приложении к полупроводнику электрического поля (рис.4.10) на электроны действует сила $\vec{F}_{,}$ направленная противоположно вектору напряженности \vec{E} , и свободные электроны приобретают скорость $\vec{v}_{,}$ направленного движения по направлению действия силы. За счет направленного движения электронов возникает электрический ток I^- (этот ток направлен против скорости $\vec{v}_{,n}$ движения отрицательных зарядов).

Электрическое поле действует и на электроны связи. Под действием этого поля один из электронов ковалентной связи, близкий к дырке, может «перескочить» на незаполненную связь – дырку, т.е. заполнить электронную вакансию (на рис.4.10 этот процесс обозначен сплошной наклонной стрелкой). Новая вакансия (дырка),



появляется на месте, оставленном этим электроном (на рис.4.10 это процесс обозначен пунктирной стрелкой). Затем следующий электрон связи занимает место образовавшейся дырки, на месте которого вновь образуется дырка. Перемещаясь таким образом против направления электрического поля, валентные электроны остаются связанными, т. к. они переходят из одного связанного состояния в другое связанное состояние. При этом по направлению поля перемещаются положительно заряженные электронные вакансии, т. е. дырки. Это движение электронной вакансии происходит таким образом, как будто на положительный заряд (дырку) со стороны электрического поля действует сила \vec{F}^+ в направлении поля. При этом дырки приобретают скорость \vec{v}_{μ}^+ направленного движения положительных зарядов и создают ток $\vec{\Gamma}$. Проводимость, обусловленная движением связанных электронов по электронным вакансиям, т. е. движением дырок, получила название дырочной проводимости. Таким образом, собственные полупроводники имеют два механизма проводимости: электронный и дырочный, а носителями тока в собственных полупроводниках являются электроны и дырки.

В дальнейшем концентрацию электронов будем обозначать n (от латинского negativus – отрицательный), а концентрацию дырок p (от латинского positivus – положительный). Т.к. электроны и дырки в собственном полупроводнике возникают и исчезают парами, то их концентрации равны:

$$n = p.$$
 (4.15)

4.5.2. Примесные полупроводники. Донорные полупроводники (полупроводники *n*-типа)

Рассмотрим 4-х валентный полупроводник (например, германий или кремний), в который добавлена 5-и валентная примесь (например, мышьяк или фосфор). Атом примеси в кристалле занимает место одного из основных атомов (германия или кремния). Четыре электрона примеси осуществляют ковалентную связь с четырьмя соседними атомами основного вещества (рис.4.11а). Пятый электрон продолжает двигаться в поле атома примеси, но сила связи этого электрона с атомом примеси в кристалле значительно меньше, чем сила связи в свободном атоме примеси, и составляет примерно 0,01 эВ.

При незначительном повышении температуры энергии тепловых колебаний атомов достаточно, чтобы пятый слабо связанный электрон оторвался от атома и стал «свободным» (рис. 4.11б). При этом разрыва ковалентной связи не происходит, т.е. дырка не образуется. Атом примеси становится положительным ионом, но перемещаться по кристаллу не может, так как ковалентными связями удерживается в узле кристаллической решетки. Атомы примеси, поставляющие электроны проводимости, называются *атомамидонорами*, а сама примесь - *донорной*. Полупроводники, содержащие донорную примесь, называют *донорными* полупроводниками или электронными полупроводниками или полупроводниками п-типа. Таким образом, полупроводник *п*-типа – это полупроводник с примесью, валентность которой больше валентности основных атомов.



Рис. 4.11

Атомы примеси искажают поле кристаллической решетки, что приводит к возникновению на энергетической схеме дополнительных примесных уровней, расположенных в запрещенной зоне. В полупроводнике *n*-типа эти уровни называются донорными. Т.к. в донорном полупроводнике для освобождения пятого электрона, т.е. его перехода в зону проводимости требуется небольшая энергия, то донорные уровни находятся вблизи дна зоны проводимости. Зонная схема донорного полупроводника приведена на рис. 4.12. При Т=0К (рис. 4.12a) валентная зона, как и в собственном полупроводнике, полностью заполнена электронами, а зона проводимости свободна. На донорных уровнях находятся электроны примеси, не участвующие в образовании ковалентных связей. Энергия E_{π} , необходимая для перехода электрона с донорного уровня в зону проводимости, называется энергией активации донорной примеси. При повышении температуры (T>0, рис. 4.12б) электроны с донорных уровней переходят в зону проводимости. Этому процессу соответствует отщепление пятого валентного электрона от атома примеси.

При T>0 возможны также переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости, в результате которых в валентной зоне образуются дырки. При *низких температурах* энергия теплового движения kT мала, поэтому переходов электронов из валентной зоны в зону проводимости много меньше, чем переходов с донорных

уровней (т.к. $E_{\mathcal{A}} << E_g$). Поэтому концентрация свободных электронов в зоне проводимости много больше концентрации дырок в валентной зоне: **n>>p**. Электроны являются основными носителями тока, а дырки – неосновными. Это область *низких температур* или *область примесной проводимости*.



Рис. 4.12



По мере увеличения температуры все больше электронов переходит с донорных уровней в зону проводимости. При темпера-Ts. туре которую называют температурой истошения примеси, все электроны с донорных уровней перейдут в 30HV проводимости (рис.4.13). Т.к. переходов из валентной зоны в зону проводимости еще мало, то в области истощения примеси концентрация n свободных электронов практически равна концентрации N_д атомов донорной

примеси: $n \approx N_{\rm A}$ и в некотором интервале температур остается постоянной (концентрация $N_{\rm A}$ атомов примеси не зависит от температуры). В данной области также преобладает примесная проводимость: n > p, и основными носителями тока являются электроны.

Дальнейшее увеличение температуры сопровождается все более интенсивным процессом перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости и образования дырок в валентной зоне. Начиная с некоторой температуры T_i число электронов, перешедших в зону проводимости из валентной зоны, становится много больше электронов, перешедших с донорных уровней. Для температур T>Ti концентрация свободных электронов практически совпадает с концентрацией носителей тока в собственном полупроводнике и равна концентрации дырок ($n \approx p$). Это значит, что полупроводник можно рассматривать как собственный. Область температур выше температуры T_i называется областью высоких температур или областью собственной проводимости.

4.5.3. Примесные полупроводники. Акцепторные полупроводники (полупроводники р-типа)

Рассмотрим 4-х валентный полупроводник (например, германий или кремний), в который добавлена 3-х валентная примесь (например, индий или бор). Атом примеси в кристалле занимает место одного из основных атомов (германия или кремния). Для образования ковалентных связей с четырьмя ближайшими соседями у атома примеси не хватает одного электрона – одна связь остается не завершенной (рис.4.14а). Это неукомплектованная связь представляет собой место, способное захватить электрон – в таком случае все связи примеси с основными атомами будут полностью завершены. Поэтому уже при небольших температурах энергии теплового движения достаточно для переброса одного из электронов ковалентной связи на место незавершенной связи примеси (рис.4.14б). Электрон закрепляется на этом месте, а примесь становится отрицательно заряженным ионом. Место, из которого ушел электрон, становится положительно заряженной дыркой. Дырка может «свободно» перемещаться по кристаллу за счет перехода на ее место других электронов ковалентной связи. Отрицательный ион остается в узле кристаллической решетки и перемещаться по кристаллу не может. В данном случае атомы примеси называют атомами-акцепторами, а примесь акцепторной. Соответственно полупроводник называется акцепторным или дырочным или полупроводником р-типа. Таким образом, полупроводник р-типа – это полупроводник с примесью, валентность которой меньше валентности основных атомов.



Рис. 4.14

На рис.4.15 показана зонная схема акцепторного полупроводника. Поскольку для перехода электрона ковалентной связи на неукомплектованную связь примеси и образования дырки необходима энергия, гораздо меньшая ширины запрещенной зоны, то в полупроводнике *p*-типа дополнительные уровни находятся вблизи потолка валентной зоны и называются *акцепторными*. Энергия E_A ,



Рис. 4.15

необходимая для перехода электрона из валентной зоны на акцепторный уровень, называется энергией активации акцепторной примеси. При *T*=0К (рис. 4.15а) валентная зона, как и в собственном полупроводнике, полностью заполнена электронами, а зона проводимости и акцепторные уровни свободны. При повышении температуры (рис. 4.15б) электроны переходят из валентной зоны на акцепторные уровни, а в валентной зоне появляются дырки. Этому процессу соответствует переход электрона ковалентной связи на неукомплектованную связь примеси.

При T>0 есть переходы и из валентной зоны в зону проводимости. Но при небольших температурах таких переходов много меньше, чем переходов на примесные уровни (т.к. $E_A << E_g$). Поэтому концентрация дырок в валентной зоне будет много больше концентрации электронов в зоне проводимости: p>>n. Поскольку концентрация дырок много больше концентрации электронов, то ток в полупроводнике будет практически только дырочный, а электронный ток можно не учитывать. Дырки являются основными носителями тока, а электроны – неосновными. Это область низких температур или область примесной проводимости.



Рис. 4.16

По мере увеличения температуры все больше электронов переходит из валентной зоны на акцепторные уровни. При *температуре* T_S истощения примеси все акцепторные уровни будут заполнены электронами (рис. 4.16). Т.к. переходов из валентной зоны в зону проводимости еще области мало. то в истошения примеси концентрация р дырок практически равна концентрации N_a атомов акцепторной примеси: $p \approx N_a$ и в некотором интервале температур

остается постоянной (концентрация N_a атомов не зависит от температуры). В данной области также преобладает примесная проводимость *p>>n*, а основными носителями тока являются дырки.

Дальнейшее увеличение температуры сопровождается все более интенсивным переходом электронов из валентной зоны в зону проводимости. Начиная с некоторой температуры T_i число электронов, перешедших в зону проводимости, становится много больше электронов, перешедших на акцепторные уровни. Для температур T>Ti концентрация свободных электронов практически совпадает с концентрацией носителей тока в собственном полупроводнике и равна концентрации дырок: $n \approx p$. Это значит, что полупроводник можно рассматривать как собственный. Область температур выше температуры T_i называется областью высоких температур или областью собственной проводимости.

4.6. Понятие об эффективной массе носителей тока

Электроны проводимости не являются свободными частицами, т.к. на них действует периодическое поле кристаллической решетки. Если проводник поместить в электрическое поле, то на электроны проводимости будут действовать силы со стороны электрического поля и поля кристаллической решетки, что не позволяет описать движение электрона при наложении на него данного внешнего поля. Оказывается, что электрону проводимости в кристалле можно приписать некоторую массу, называемую эффективной массой, такую, что действие идеальной кристаллической решетки на электроны проявляется только в величине эффективной массы. В таком случае электрон проводимости можно рассматривать как свободную квазичастицу, т.е. частицу на которую в кристалле не действую никакие силы, если нет внешнего воздействия (термин "квазичастица" означает, что речь идет об объекте, который мы рассматриваем и описываем как частицу). Движение электронов проводимости при воздействии внешней силы (в частности сил электрического поля) можно рассматривать как движение отрицательно заряженной квазичастицы с некоторой эффективной массой m_n, на которую действует только внешняя сила. То же относится и к дыркам движение дырок можно представить как движение свободных положительно заряженных квазичастиц с некоторой эффективной массой т_п.

4.7. Зависимость концентрации носителей тока в полупроводниках от положения уровня Ферми. Закон действующих масс.

Одним из основных параметров, характеризующих носители тока в полупроводниках, является химический потенциал μ . В применении к полупроводникам для любой температуры его обычно называют энергией Ферми (сравните с определением энергии Ферми для металла (п.4.2)). В большинстве полупроводников число электронов N в зоне проводимости много меньше числа Z квантовых состояний (уровней) в этой зоне: $\frac{N}{Z}$ <<1. Следовательно, электронный газ в полупроводниках является невырожденным (см. п.3.2) и к

нему можно применить распределение Максвелла-Больцмана (п. 3.4). То же относится и к дыркам – в большинстве полупроводников дырки представляют собой невырожденный газ положительно заряженных частиц. Полупроводники, в которых газ электронов и дырок является невырожденным, называются невырожденными, и именно они в дальнейшем будут рассматриваться. Для невырожденных полупроводников концентрация носителей тока зависит от положения уровня Ферми и температуры *T*.

Сначала оценим положение уровня Ферми μ при T = 0К. При этой температуре уровни энергии зоны проводимости свободны, а валентная зона заполнена электронами полностью (рис. 4.7). Значит энергия Ферми меньше энергии уровней зоны проводимости и больше энергии уровней валентной зоны (см. формулу 4.2). Следовательно, уровень Ферми μ при T=0К расположен между валентной зоной и зоной проводимости, т.е. в запрещенной зоне (рис.4.17). При повышении температуры положение уровня Ферми в полупроводниках меняется, но в невырожденных полупроводниках он остается в запрещенной зоне.

На рис.4.18 показана зонная схема невырожденного полупроводника при T>0К. В зоне проводимости такого полупроводника находятся свободные электроны, а в валентной зоне – дырки. Выберем нулевой уровень отсчета кинетической энергии электронов E=0 на дне зоны проводимости. Тогда энергия электронов в зоне проводимости будет принимать значения от нуля до E_m – максимальной энергии в зоне проводимости (энергия потолка зоны). Обозначим μ - химический потенциал для электронов (расстояние от зоны проводимости до уровня Ферми), μ' - химический потенциал для



дырок (расстояние от уровня Ферми до валентной зоны), E_g – ширина запрещенной зоны. Т.к. уровень Ферми расположен ниже нулевого уровня энергии, то μ <0, μ' <0, и выполняется соотношение:

$$\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\mu}' = -\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{g}} \,. \tag{4.16}$$

Найдём число N свободных электронов в полупроводнике объёмом V при T > 0 К. Для этого воспользуемся соотношением (3.5):

$$dN(E) = f(E) \cdot dZ(E),$$

где в данном случае dN(E) - число электронов в зоне проводимости с энергией в интервале от E до E + dE (см. рис. 4.18), $f(E) = e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}}$ - функция распределения Максвелла-Больцмана (см. $4\pi V(2m)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE$

формулу (3.8)), $dZ(E) = \frac{4\pi V(2m_n)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE}{h^3}$ – число состояний

электронов в зоне проводимости с энергией от E до E + dE (см. формулу (3.19)), m_n –эффективная масса электрона (п. 4.6). С учетом вышеприведенных формул получим, что

$$dN(E) = \frac{4\pi V (2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \cdot E^{1/2} \cdot dE \qquad (4.17)$$





Тогда полное число N электро-

нов в зоне проводимости можно

$$V = 4\pi V \left(\frac{2m_n}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\mu}{kT}} \int_{0}^{E_m} e^{-\frac{E}{kT}} \cdot E^{\frac{1}{2}} \cdot dE$$
(4.18)

Рис. 4.19

Интеграл в (4.18) при произвольном E_m можно вычислить

только численными методами. Но поскольку при $E > E_m$ подынтегральная функция $e^{-\frac{E}{kT}E^2}$ очень быстро убывает до нуля (рис. 4.19), а интеграл (4.18) численно равен площади под графиком в интервале от 0 до E_m , то при замене верхнего предела интегрирования E_m на бесконечность ∞ ошибка в расчете интеграла будет ничтожно мала 69

(площади под кривой на интервале от 0 до E_m и на интервале от 0 до ∞ практически одинаковы). Таким образом:

$$N = 4\pi V \left(\frac{2m_n}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{\mu}{kT}} \int_{0}^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} \cdot E^{\frac{1}{2}} \cdot dE .$$
 (4.19)

Интеграл в (4.19) найдем по таблице интегралов:

$$\int_{0}^{\infty} E^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E}{kT}} dE = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^{\frac{3}{2}}$$

Подставляя это выражение в (4.19) и сделав алгебраические преобразования, получим, что **число электронов в объеме** *V* полупроводника:

$$N = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot V \quad . \tag{4.20}$$

Тогда концентрация электронов проводимости (n=N/V) в полупроводнике при температуре *T*:

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{\frac{\mu}{kT}}$$
(4.21)

Аналогично для концентрации р дырок можно получить:

$$p = 2 \left(\frac{2\pi m_p kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{\frac{\mu'}{kT}}, \qquad (4.22)$$

где *m*_p – эффективная масса дырки.

Т.к. в (4.21) и (4.22) экспоненциальный множитель дает гораздо больший вклад в зависимость от температуры, чем степенной $(T^{3/2})$, то последним можно пренебречь. Поэтому для упрощения записи данных формул введем обозначения:

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi \ m_n kT}{h^2}\right)^{3/2}, \ N_V = 2 \left(\frac{2\pi \ m_p kT}{h^2}\right)^{3/2}.$$
 (4.23)

С учетом (4.23) выражения (4.21) и (4.22) для концентрации свободных электронов и дырок соответственно принимают вид:

$$n = N_C e^{\mu/kT}, \quad p = N_V e^{\mu'/kT},$$
(4.24)

где коэффициенты N_C и N_V – это эффективная плотность состояний соответственно электронов и дырок, зависящая от их эффективных масс (4.23). Из (4.24) следует, что концентрация носителей тока в

полупроводнике зависит от положения уровня Ферми (μ и μ') и температуры *T*, причем с ростом температуры концентрация свободных электронов и дырок увеличивается (т.к. $\mu < 0$ и $\mu' < 0$).

Подчеркнем, что сделанный вывод формул для концентрации не зависит от наличия донорных и акцепторных уровней и справедлив при наличии любых примесей, если полупроводник невырожденный.

Перемножим соответственно левые и правые части формул (4.24):

$$np = N_C \cdot e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot N_V \cdot e^{\frac{\mu'}{kT}} = N_C N_V e^{\frac{\mu+\mu'}{kT}}.$$
(4.25)

Т.к. в соответствии с (4.16): $\mu + \mu' = -E_g$, выражение (4.25) принимает вид:

$$np = N_C N_V e^{-\frac{E_g}{kT}}.$$
(4.26)

Уравнение (4.26) выражает закон действующих масс для носителей тока в полупроводнике: *при фиксированной температуре произведение концентраций электронов и дырок для данного полупроводника есть величина постоянная*. Если, например, добавив в полупроводник донорную примесь, увеличить концентрацию электронов, то соответственно уменьшится концентрация дырок.

4.8. Концентрация носителей тока в полупроводниках

4.8.1. Концентрация носителей тока и положение уровня Ферми в собственных полупроводниках

В собственных полупроводниках условие электронейтральности означает, что концентрация свободных электронов равна концентрации дырок (п. 4.5.1, уравнение (4.15)): n=p. Следовательно, закон действующих масс (4.26) для собственных полупроводников можно записать в виде:

$$np = n^2 = p^2 = N_C N_V e^{-\frac{E_g}{kT}}.$$

Откуда, извлекая квадратный корень, получаем выражение для концентраций электронов и дырок в собственном полупроводнике:

$$n = p = \sqrt{N_C N_V e^{-\frac{E_g}{2kT}}}$$
 (4.27)

Подставляя в (4.27) выражения (4.23) для коэффициентов N_C и N_V , можно выразить концентрацию через эффективные массы электронов и дырок:

$$n = p = 2 \left(\frac{2\pi \sqrt{m_n m_p} kT}{h^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} .$$
(4.28)

Из (4.27) и (4.28) видно, что равновесная концентрация носителей тока в собственном полупроводнике экспоненциально зависит (т.е. как «е» в степени) от ширины E_g запрещенной зоны и температуры *T*. Причем эта зависимость очень резкая. Так при ширине запрещенной зоны E_g =1эв и изменении температуры от 0°C до 100°C ($T_2/T_1\approx1,37$) концентрация носителей увеличивается в 250 раз, а при изменении температуры от 0°C до 200°C ($T_2/T_1\approx1,73$) в 5000 раз. С точки зрения зонной теории возрастание концентрации носителей тока при увеличении температуры означает, что чем выше температура, тем больше электронов переходит из валентной зоны в зону проводимости. С точки зрения модели кристаллической решётки чем выше температура, тем больше связей разрывается, что приводит к увеличению числа носителей тока.

Зависимость концентрации носителей от температуры удобно изображать в логарифмическом масштабе. Прологарифмируем уравнение (4.27):

$$ln(n) = ln(p) = \frac{1}{2} ln(N_C N_V) - \frac{E_g}{2k} \cdot \frac{1}{T}.$$
(4.29)



Первое слагаемое правой части (4.29) зависит от температуры по логарифмическому закону (см. (4.23): $ln(N_CN_V) \sim ln(T)$). Эта зависимость намного слабее, чем у второго слагаемого. Поэтому первое слагаемое в правой части можно считать постоянной величиной в сравнении со вторым. В таком случае зависимость логарифма концентрации ln(n) от обратной температуры 1/T, т.е. ln(n)=f(1/T), будет иметь вид прямой линии с тангенсом угла

наклона $tg\alpha = E_g/2k$, что схематически показано на рис.4.20. Очевидно, что такая же зависимость будет и для концентрации дырок *p*. Найдем положение уровня Ферми μ в собственных полупроводниках. Для этого приравняем правые части выражений (4.21) и (4.28) для концентрации электронов:

$$2\left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{\frac{\mu}{kT}} = 2\left(\frac{2\pi\sqrt{m_n m_p} kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

Далее проведем в этом выражении сокращения, затем прологарифмируем и выразим μ :

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = \left(\frac{m_p}{m_n}\right)^{3/4} \cdot e^{-\frac{E_g}{2kT}} \Rightarrow \frac{\mu}{\kappa T} = \frac{3}{4} \ln \frac{m_p}{m_n} - \frac{E_g}{2kT} \Rightarrow$$
$$\mu = -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \cdot \ln \frac{m_p}{m_n}.$$
(4.30)

Соотношение (4.30) определяет положение уровня Ферми в собственных полупроводниках. При абсолютном нуле (T = 0K) из (4.30) получаем, что

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{g}}}{2},\tag{4.31}$$

т.е. уровень Ферми располагается в середине запрещенной зоны (рис. 4.17). С повышением температуры он смещается вверх, если $m_p > m_n$, или вниз, если $m_p < m_n$. Однако в большинстве практических случаев это смещение незначительно и им можно пренебречь.

4.8.2. Концентрация носителей тока в примесных полупроводниках

Низкие температуры. Можно показать, что в примесных невырожденных полупроводниках (п. 4.5.2, 4.5.3) с примесью одного типа (донорной или акцепторной) зависимость концентрации основных носителей от температуры аналогична зависимости для собственного полупроводника (4.27) с заменой ширины запрещенной зоны на энергию активации примеси: донорный полупроводник:

$$\boldsymbol{n} = \sqrt{N_C \frac{N_{\mathcal{A}}}{2}} e^{-\frac{E_{\mathcal{A}}}{2kT}}, n \gg p, \qquad (4.32)$$

акцепторный полупроводник:
$$p = \sqrt{N_V \frac{N_A}{2}} e^{-\frac{E_A}{2kT}}, p >> n.$$
 (4.33)

В этих уравнениях N_A , N_A - концентрация соответственно донорной и акцепторной примесей; E_A , E_A – энергия активации соответственно донорной и акцепторной примесей.

Концентрацию неосновных носителей (п. 4.5.2, 4.5.3), которыми в донорном полупроводнике являются дырки, а в акцепторном – электроны, можно найти из закона действующих масс (4.26). Для донорного полупроводника:

$$p = \frac{N_C N_V}{n} e^{-\frac{E_g}{kT}}, \qquad (4.34)$$

где p – концентрация неосновных носителей (дырок), n – концентрация основных носителей (электронов), найденная по формуле (4.32). Для *акцепторного полупроводника* из закона действующих масс (4.26)получаем:

$$\boldsymbol{n} = \frac{N_C N_V}{p} e^{-\frac{E_g}{kT}},\tag{4.35}$$

где *n* – концентрация неосновных носителей (электронов), *p* – концентрация основных носителей (дырок), найденная по формуле (4.33).

Чтобы построить график зависимости логарифма концентрации ln(n) и ln(p) от обратной температуры 1/T для примесных полупроводников, прологарифмируем уравнения (4.32) и (4.33):

$$ln(n) = \frac{1}{2}\ln(\frac{N_C N_A}{2}) - \frac{E_A}{2k}\frac{1}{T}; \quad \ln(p) = \frac{1}{2}\ln(\frac{N_V N_A}{2}) - \frac{E_A}{2k}\frac{1}{T}, \quad (4.36)$$

Так же как и в уравнении (4.29) первое слагаемое правой части в уравнениях (4.36) пропорционально ln(T) и его можно считать постоянной величиной в сравнении со вторым слагаемым. Поэтому для примесного полупроводника зависимость логарифма концентрации ln(n) основных носителей от обратной температуры 1/T аналогична этой зависимости для собственного полупроводника (рис.4.20). Соответствующий график (рис.4.21) – прямая линия с тангенсом угла наклона $tg \alpha = E_A/2k$ – для донорного полупроводника, $tg \alpha = E_A/2k$ – для акцепторного полупроводника.

Область истощения примеси (п. 4.5.2, 4.5.3). В этой области температур концентрация основных носителей рана концентрации примеси и остается постоянной: $n=N_{\mathcal{A}}=const$, n>>p – для донорного полупроводника, $p=N_{\mathcal{A}}=const$, p>>n – для акцепторного полупровод-

ника. Т.к. концентрация основных носителей постоянна, то логарифм концентрации ln(n) тоже постоянен. Поэтому на графике в логарифмическом масштабе зависимость концентрации от обратной температуры изобразится прямой горизонтальной линией (рис.4.21). Концентрацию неосновных носителей можно найти из соответствующего закона действующих масс (4.26).

Область высоких температур (п. 4.5.2, 4.5.3). В этой области температур концентрация носителей такая же, как и в собственном полупроводнике. Следовательно, в этой области температур зависимость концентрации носителей тока повторяет зависимость (4.29), приведенную на рис.4.20. На рис.4.21 этой области температур соответствует линия с тангенсом угла наклона равным $tg\alpha = E_g/2k$.



Рис. 4.21

5. Электропроводность металлов и полупроводников

5.1. Скорость дрейфа. Подвижность. Температурная зависимость подвижности носителей тока в металлах и полупроводниках

В отсутствие электрического поля носители тока движутся хаотически по всему объёму кристалла. При помещении проводника в электрическое поле напряжённостью \vec{E} на скорость \vec{v}_x хаотического движения носителей накладывается скорость \vec{v}_{yn} упорядоченного движения носителей, которая вызвана действием сил электрического поля и для всех носителей тока одного знака направлена в одну и туже сторону (подробнее см. «Электростатика. Постоянный электрический ток»). Дрейфовой скоростью (скоростью направленного движения) называют среднюю скорость упорядоченного движения носителей тока, которую они приобретают под действием электрического поля:

$$\vec{v}_{\partial p.} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i}{N}, \quad \vec{v}_{\partial p.} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i}{N}$$

где $\vec{v}_i = \vec{v}_{ix} + \vec{v}_{iyn}$ - скорость *i*-го носителя тока. Так как, $\sum_{i=1}^N \vec{v}_{ix} = 0$, то

скорость дрейфа определяется скоростями упорядоченного движения носителей тока:

$$\vec{\nu}_{\partial p.} = \frac{\Sigma \vec{\nu}_{iyn}}{N}, \qquad (5.1)$$

где N - число носителей тока в объёме кристалла.

Подвижностью носителей тока называют отношение скорости дрейфа к напряжённости электрического поля:

$$u = \frac{\upsilon_{\partial p.}}{E} \,. \tag{5.2}$$

В векторном виде:

$$\upsilon_{\partial p.} = u\vec{E} , \qquad (5.3)$$

т.е. скорость дрейфа пропорциональна напряжённости электрического поля. Плотность тока *j* связана с концентрацией *n* носителей тока и скоростью дрейфа υ_{dp} соотношением:

$$\vec{j} = en\vec{v}_{\partial p}.$$
 (5.4)

Подставляя в (5.4) выражение (5.3) для скорости дрейфа, получим:

$$\vec{j} = enu\vec{E} . \tag{5.5}$$

Сравнивая (5.5) с законом Ома в дифференциальной форме:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} , \qquad (5.6)$$

где σ - удельная электропроводность, получим связь удельной электропроводности с концентрацией и подвижностью:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{enu} \ . \tag{5.7}$$

Величина обратная удельной электропроводности называется удельным сопротивлением:

$$\rho = 1/\sigma. \tag{5.8}$$

Из формулы (5.7) следует, что электропроводность материала зависит от концентрации и подвижности носителей тока. Концентрация носителей тока в металлах и полупроводниках определяется соответственно выражениями (4.6) и (4.28). Величина подвижности зависит от механизма столкновения носителей тока с частицами вещества. Зависимость подвижности от температуры в металлах и полупроводниках существенно отличается, так как в металлах и носители тока (электроны) представляют собой вырожденный коллектив частиц, а в полупроводниках электроны и дырки образуют невырожденные коллективы частиц.

Рассмотрим качественно природу электрического сопротивления металла. В идеальной кристаллической решетке, т.е. в структуре в которой атомы расположены в строго определённом симметричном порядке, электроны не должны испытывать при своём движении никакого сопротивления. Сопротивление обусловлено нарушениями - дефектами идеального строения решетки. Дефекты кристаллической решётки связаны с тепловыми колебаниями атомов в узлах решетки и искажением решетки из-за наличия примесей, вакансий и т.п. Электроны при своём упорядоченном движении сталкиваются с атомами, совершающими колебания - происходит процесс рассеяния электронов, вследствие чего электроны передают атомам часть своей кинетической энергии (связанной с дрейфовой скоростью), в результате подвижность электронов уменьшается. (Энергию колеблющихся атомов кристаллической решётки можно представить как энергию квазичастиц, называемых фононами. Рассеяние электронов на атомах можно рассматривать как рассеяние на фононах). Таким образом, сопротивление металла обусловлено рассеянием электронов на основных атомах металла и на примесях. Поэтому чем чище металл и ниже его температура, тем сопротивление меньше. При низких

температурах энергия колебаний атомов незначительна и преобладает рассеяние электронов на дефектах кристаллической решетки примесях. Так как концентрация примесей не изменяется с температурой, то *при низких температурах подвижность носителей тока в металлах остается постоянной*:

u = const. (5.9)

С повышением температуры энергия колебаний атомов увеличивается, процессы рассеяния электронов на колебаниях становятся более интенсивными, в результате подвижность электронов с увеличением температуры уменьшается. Можно показать, что в металлах, *при не очень низких температурах, подвижность обратно пропорциональна температуре*:

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{C} / \boldsymbol{T} \,, \tag{5.10}$$

где С – постоянная, зависящая от строения и состава проводника.

В полупроводниках в зависимости от температуры, наличия примеси, ее количества и заряда примеси, *температурная зависимость подвижности имеет вид*:

$$u=CT^{\gamma}, \tag{5.11}$$

где *С* –постоянная зависящая от строения и состава полупроводника; γ - в зависимости от температуры и типа рассеяния лежит в пределах -3/2 $\leq \gamma \leq +3/2$. В области высоких температур $\gamma=3/2$, в области низких температур $\gamma=-3/2$.

5.2. Температурная зависимость электропроводности металлов

В металлах носителями тока являются свободные электроны. Удельная электропроводность (5.7) металла σ =*enu*, где *n* и *и*концентрация и подвижность электронов. Концентрация электронов в металле с повышением температуры практически не изменяется (п. 4.3), т.е. ее можно считать постоянной *n*=const. При низких температурах постоянной является и подвижность: *u*=const (см. 5.9). Поэтому *при низких температурах постоянными являются удельная электропроводность и удельное сопротивление* (5.8) металлов:

$$\sigma$$
=const, ρ =const (5.12)

При высоких температурах концентрация электронов попрежнему остается постоянной (n=const), а подвижность u=C/T в соответствии с (5.10). Поэтому выражение для электропроводности принимает вид:

$$\sigma = enC/T \Longrightarrow \sigma \sim \frac{l}{T},$$

т.е. дельная электропроводность обратно пропорциональна термодинамической температуре, а удельное сопротивление $\rho=1/\sigma$ будет прямо пропорционально температуре $\rho \sim T$. Таким образом, в металлах при не очень низких температурах:

$$\sigma \sim \frac{1}{T}, \quad \rho \sim T \,. \tag{5.13}$$

График зависимости удельного сопротивления ρ металла от температуры показан на рис.5.1 (кривая 1). Низким температурам



соответствует горизонтальный участок графика. Сопротивление металла при низких температурах ($T \rightarrow 0K$) называют остаточным сопротивлением ρ_0 . Области высоких температур соответствует наклонная прямая на рис. 5.1.

У некоторых чистых металлов вблизи абсолютного нуля электрическое сопротивление скачком обращается в нуль (рис5.1, пунктирная линия 2). Это явление называется сверхпроводимостью. Температура, при

которой происходит переход в сверхпроводящее состояние, называется критической температурой T_K . Для металлов максимальная критическая температура равна T_K =23К. В 1986 г. была обнаружена высокотемпературная сверхпроводимость при T≈100К у некоторых керамических соединений. В явлении сверхпроводимости квантовомеханические эффекты проявляются не в микроскопических, а в макроскопических масштабах. Теория сверхпроводимости очень сложна и здесь не рассматривается.

5.3. Температурная зависимость электропроводности полупроводников

5.3.1. Температурная зависимость электропроводности собственных полупроводников

В собственных полупроводниках носителями тока являются электроны и дырки, поэтому удельная электропроводность собственного полупроводника равна сумме электропроводностей обусловленных электронами и дырками. С учетом этого выражение для электропроводности (5.7) принимает вид:

$$\sigma = enu_n + epu_p, \tag{5.14}$$

где u_n и u_p – соответственно подвижность электронов и дырок. Так как в собственных полупроводниках концентрации электронов и дырок одинаковы: n=p, то из (5.14) получим:

$$\sigma = en(u_n + u_p), \tag{5.15}$$

Концентрация электронов и дырок в собственном полупроводнике определяется соотношением (4.27):

$$n = \sqrt{N_C N_V e^{-\frac{E_g}{2kT}}},$$

где коэффициенты N_C и $N_{\mathcal{A}}$ определяются выражениями (4.23). Так как нас интересует температурная зависимость, выделим в (4.23) множители, включающие температуру T, а остальные величины обозначим некоторой константой «A». Тогда (4.27) можно представить в виде:

$$n = AT^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{E_g}{2kT}}.$$
 (5.16)

В п. 5.1 было указано, что зависимость подвижности носителей в полупроводниках можно представить в виде $u=CT^{\gamma}$, где C – некоторая постоянная; γ - в зависимости от температуры и типа рассеяния лежит в пределах $-3/2 \le \gamma \le +3/2$. Для электронов и дырок соответственно можно записать:

$$u_n = C_n T^{\vee}, \ u_p = C_p T^{\vee}$$
 (5.17)
Подставляя в (5.15) уравнения (5.16) и (5.17) получим:

$$\sigma = eA(C_n + C_p)T^{\gamma + \frac{3}{2}}e^{-\frac{L_g}{2kT}}.$$

Обозначим в этом выражении $A(C_n+C_p)=B$, где B - некоторая константа, а показатель степени при температуре $\beta=\gamma+3/2$, где β в зависимости от температуры и типа рассеяния лежит в пределах $0 \le \beta \le 3$. Таким образом, температурную зависимость электропроводности собственного полупроводника можно представить в виде:

$$\sigma = eBT^{\beta}e^{-\frac{L_g}{2kT}}.$$
(5.18)

Как уже отмечалось, экспоненциальная зависимость очень резкая. Поэтому в (5.18) основную роль играет экспоненциальный множитель. С увеличением температуры электропроводность растет вследствие увеличения числа переходов электронов из валентной зоны в зону проводимости. Температурная зависимость подвижности при этом не оказывает существенного влияния. В связи с этим обычно множитель перед экспонентой принимают за некоторую константу σ_0 и уравнение (5.18) представляют в виде:

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{2kT}}.$$
 (5.19)

Соотношение (5.19) выражает зависимость удельной электропроводности собственных полупроводников от температуры: с повышение температуры электропроводность возрастает по экспоненциальному закону.

Т.к. удельное сопротивление $\rho=1/\sigma$, то, подставляя (5.19), получим зависимость удельного сопротивления собственных полупроводников от температуры:

$$\rho = \rho_0 e^{\frac{E_g}{2kT}}.$$
 (5.20)

Выражение (5.20) показывает, что с увеличением температуры удельное сопротивление полупроводников уменьшается.

Прологарифмируем уравнение (5.19):



$$ln(\sigma) = ln(eB) + \beta ln(T) - \frac{E_g}{2k} \frac{1}{T}, \quad (5.21)$$

Так же как в (4.29), логарифмической зависимостью от температуры второго слагаемого можно пренебречь в сравнении с третьим. В таком случае зависимость $ln(\sigma)=f(1/T)$ имеет вид прямой линии с тангенсом угла наклона

Рис.5.2

Ln(σ)

$$tg\alpha = E_g/2k, \qquad (5.22)$$

т.е. полностью повторяет зависимость ln(n)=f(1/T). На рис.5.2 схематически показана зависимость $ln(\sigma)=f(1/T)$ для собственного полупроводника.

5.3.2. Температурная зависимость электропроводности примесных полупроводников

Рассмотрим температурную зависимость примесных полупроводников на примере донорного полупроводника.

Область низких температур. При низких температурах в донорном полупроводнике электропроводность обусловлена практически только электронами (п. 4.5.1). Концентрация электронов (4.32):

 $n = \sqrt{N_C \frac{N_A}{2}} e^{-\frac{E_A}{2kT}}$, или подставляя N_C из (4.23) и выделяя зависи-

мость от температуры, можно записать:

$$n = AT^{\frac{3}{4}}e^{-\frac{E_{\mathcal{I}}}{2kT}}.$$
 (5.23)

Если в выражение (5.7) для удельной электропроводности *σ=епи*, подставить концентрацию (5.23) и подвижность (5.11), получим:

$$\sigma = eBT^{\beta}e^{-\frac{E_{\mathcal{A}}}{2kT}},$$
(5.24)

где B – некоторая постоянная, а β лежит в пределах -3/4 $\leq \beta \leq 9/4$. Так же как и в (5.18), здесь основную роль в температурной зависимости играет экспонента. С увеличением температуры электропроводность растет вследствие увеличения числа переходов электронов с донорных уровней в зону проводимости. Температурная зависимость подвижности при этом не оказывает существенного влияния. Обозначив множитель перед экспонентой в (5.24) σ_0 , получим выражение для удельной электропроводности донорных полупроводников:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{\theta} \boldsymbol{e}^{-\frac{E_{\mathcal{A}}}{2kT}}.$$
 (5.25)

Прологарифмируем уравнение (5.24):

$$ln(\sigma) = ln(eB) + \beta ln(T) - \frac{E_{\mathcal{A}}}{2k} \frac{1}{T}, \qquad (5.26)$$

Так же как в (5.21), логарифмической зависимостью от температуры второго слагаемого можно пренебречь в сравнении с третьим. В таком случае зависимость $ln(\sigma)=f(1/T)$ в области низких температур имеет вид прямой линии с тангенсом угла наклона равным

$$tg\alpha = E_{\mathcal{A}}/2k, \qquad (5.27)$$



т.е. полностью повторяет зависимость ln(n)=f(1/T). На рис.5.3 схематически показана зависимость $ln(\sigma)=f(1/T)$ для области низких температур донорного полупроводника.

Область истошения В примеси. этой области температур концентрация электронов постоянна и равна концентрации атомов донорной примеси (п. 4.5.2, 4.7.2): *n*=*N*_Л. При этом электроны являются основными носителями тока дырочной И электропроводностью можно

пренебречь. В таком случае в выражении для электропроводности σ =*enu* от температуры зависит только подвижность *u*, а концентрация $(n=N_{d}=\text{const})$ не зависит от температуры. Поэтому электропроводность σ зависит от температуры по тому же закону (5.17), что и подвижность и может с увеличение температуры либо расти, либо уменьшаться в зависимости от показателя степени γ в (5.17). В логарифмическом масштабе (рис. 5.3) эта зависимость пропорциональна ln(T) и будет на участке области истощения примеси практически прямой горизонтальной линией.

В области высоких температур концентрация носителей (п. 4.5.2, 4.7.2), а, следовательно, и электропроводность примесного полупроводника будет такая же, как у собственного (рис.5.3)

Все сказанное для электропроводности донорного полупроводника справедливо и для акцепторного: в выше изложенных рассуждениях надо концентрацию электронов *n* заменить на концентрацию дырок *p* (соответственно N_{II} на N_A , а E_{II} на E_A).

Библиографический список

1. Савельев И.В. Курс физики: Учеб. В 3-х т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. М.: Наука, 1989. - 304с.

2. Сивухин Д.В. Атомная и ядерная физика. Учеб. пособие. В 2-х ч. Ч. 1. Атомная физика. М.: Наука. 1986. – 416 с.

3. Трофимова Т.И. Курс физики. Учеб. пособие для вузов. М.: Высшая школа. 2003. -541 с.

4. Бондарев Б.В., Спирин Г.Г. Курс общей физики. Учеб. пособие. М.: Высшая школа. 2005. -560 с.

5. Детлаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики. Учеб. пособие для студ. втузов. М.: Академия. 2005. -720 с.

6. Епифанов Г.И. Физика твердого тела. Учеб. пособие. Спб.: Лань. 2010. -288 с.

оглавление

Предисловие	3
Введение	4
1. Квантовая оптика	5
1.1. Тепловое излучение	5
1.2. Внешний фотоэффект	9
1.3. Корпускулярно-волновой дуализм света. Фотоны	12
1.4. Эффект Комптона	14
2. Квантовая механика	16
2.1. Гипотеза и формула де Бройля	16
2.2. Соотношение неопределенностей	17
2.3. Волновая функция	18
2.4. Уравнение Шредингера для стационарного состояния	20
2.5. Частица в потенциальной яме (ящике)	21
2.6. Прохождение частицы через потенциальный барьер	25
2.7. Квантовый осциллятор	26
2.8. Уравнение Шредингера для атома водорода. Энергия	
электрона в атоме водорода	27
2.9. Излучение и поглощение энергии атомом. Формула	
Бальмера-Ридберга	29
2.10. Квантовые числа. Квантование момента импульса	31
2.11. Спин электрона. Правило отбора. Фермионы и бозоны.	
Принцип Паули	32
2.12. Характеристики состояния электрона в атоме. Периодиче- ская система элементов	33
3. Элементы квантовой статистики	37
3.1. Термодинамический и статистический методы описания состояния системы. Химический потенциал	37
3.2. Принцип тождественности. Фермионы и бозоны. Вырож- денные и невырожденные коллективы частиц	38
3.3. Число частиц в элементарном интервале энергий	39

	3.4. Функции распределения Ферми-Дирака, Бозе-Эйнштейна и Максвелла-Больцмана.
	3.5. Число состояний в элементарном интервале импульсов
	3.6. Число состояний в элементарном интервале энергий
4	. Зонная теория твердых тел
	4.1. Энергетические зоны в кристаллах. Металлы, полупроводники и диэлектрики с точки зрения зонной теории
	4.2. Электронный газ в металле. Функция Ферми-Дирака для электронного газа в металле
	4.3. Число свободных электронов и уровень Ферми в металле
	4.4. Средняя энергия электронов в металле при $T = 0$ К
	4.5. Зонные схемы и модели кристаллической решетки полупроводников
	4.5.1. Собственные полупроводники
	4.5.2. Примесные полупроводники. Донорные полупроводни- ки (полупроводники <i>n</i> -типа)
	4.5.3. Примесные полупроводники. Акцепторные полупровод- ники (полупроводники <i>p</i> -типа)
	4.6. Понятие об эффективной массе носителей тока
	4.7. Зависимость концентрации носителей тока в полупроводни- ках от положения уровня Ферми. Закон действующих масс
	4.8. Концентрация носителей тока в полупроводниках
	4.8.1. Концентрация носителей в собственных полупроводни- ках
	4.8.2. Концентрация носителей в примесных полупроводниках
5	. Электропроводность металлов и полупроводников
	5.1. Скорость дрейфа. Подвижность. Температурная зависи- мость подвижности носителей тока в металлах и полупро- водниках.
	5.2. Температурная зависимость электропроводности метал- лов
	5.3. Температурная зависимость электропроводности полупроводников
	5.3.1. Температурная зависимость электропроводности

собственных полупроводников	79
5.3.2. Температурная зависимость электропроводности	0.1
примесных полупроводников	81
Библиографический список	83

Учебное издание

Квантовая физика

конспект лекций

Авторы:

СИВКОВА Ольга Дмитриевна ПОДОЛЬСКИЙ Вадим Александрович РЕЗВОВ Юрий Герасимович

Подписано в печать . Формат 60х84^{1/16} Бумага типографская. Отпечатано на ризографе. Усл.печ.л. 2,0 . Уч.-изд.л. 2,26. Тираж 100 экз. Заказ №

ГОУ ВПО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» Новомосковский институт (филиал). Издательский центр Адрес университета: 125047, Москва, Миусская пл., 9 Адрес института: 301665, Новомосковск, Тульской обл., ул. Дружбы, 8