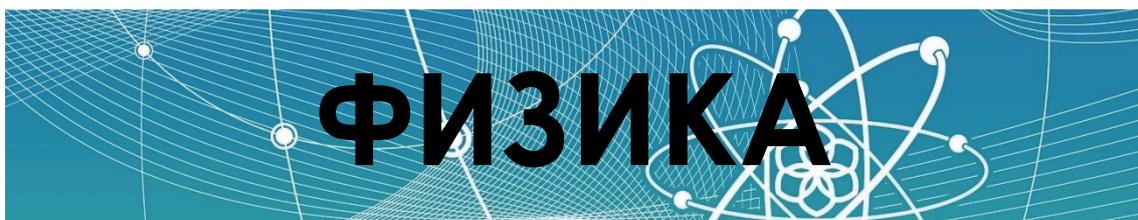


Учреждение образования  
«БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**Д. В. Кленицкий**



**Тексты лекций  
для студентов инженерно-технических  
специальностей**

Минск 2019

УДК [53+539.1](075.8)  
ББК 22.36я73  
К48

Рассмотрены и рекомендованы к изданию редакционно-издательским советом Белорусского государственного технологического университета.

Р е ц е н з е н т ы :

кандидат физико-математических наук, доцент,  
заведующий кафедрой технической физики БНТУ

*И. А. Хорунжий;*

кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры теоретической физики и астрофизики БГУ

*Г. С. Шуляковский*

**Кленицкий, Д. В.**

К48 Физика. Строение и свойства вещества : тексты лекций для студентов инженерно-технических специальностей / Д. В. Кленицкий. – Минск : БГТУ, 2019. – 63 с.

Предлагаемое издание составлено на основе действующей учебной программы по физике для студентов инженерно-технических специальностей. В текстах лекций главное внимание уделено выяснению физического смысла и содержанию основных понятий и законов атомной и ядерной физики. Изложение материала позволяет использовать пособие как при изучении, так и в процессе повторения, обобщения и систематизации пройденного материала, а также при самостоятельной подготовке студентов к сдаче зачетов и экзаменов.

УДК [53+539.1](075.8)  
ББК 22.36я73

© УО «Белорусский государственный  
технологический университет», 2019  
© Кленицкий Д. В., 2019

# Глава 1

## СТРОЕНИЕ И СПЕКТРЫ АТОМА

### § 1.1. Ядерная модель атома и опыты Резерфорда

*Атомом* называют наименьшую частицу химического элемента, обладающую его химическими свойствами. В начале 20-го века было установлено, что атом состоит из положительно заряженного ядра и окружающей его электронной оболочки, имеющей отрицательный заряд. Напомним, что заряд электрона отрицательный и по модулю равен элементарному заряду, т. е.  $q_e = -e^1$ .

Размеры ядра составляют  $10^{-13}$ – $10^{-12}$  см. Размеры самого атома, определяемые электронной оболочкой, примерно в  $10^5$  раз больше. Однако почти вся масса атома (не менее 99,95%) сосредоточена в ядре. В атоме заряд ядра равен по модулю суммарному заряду всех его электронов, так что в целом атом является электрически нейтральным, т. е. его электрический заряд равен нулю. Но электронная оболочка может терять или приобретать электроны. В этом случае атом превращается в положительный или отрицательный *ион*. Химические свойства атома определяются электронной оболочкой, точнее, ее наружными электронами. Такие электроны сравнительно слабо связаны с атомом и поэтому наиболее подвержены электрическим воздействиям со стороны других атомов.

Экспериментальное подтверждение изложенной модели атома было дано Э. Резерфордом в 1911 г., поэтому она заслуженно называется *моделью Резерфорда*. По предложению и под руководством Э. Резерфорда его ученики Гейгер Х. и Марсден Э. провели эксперименты по зондированию атомов с помощью альфа-частиц<sup>2</sup> ( $\alpha$ -частиц), испускаемых радиоактивными веществами. Масса этих частиц примерно в 7300 раз больше массы электрона, а их положительный заряд равен удвоенному

<sup>1</sup>Элементарный заряд  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  Кл.

<sup>2</sup>Альфа-частица – дважды ионизированный атом гелия  $\text{He}^{++}$  (атом гелия, у которого два электрона в электронной оболочке отсутствуют).

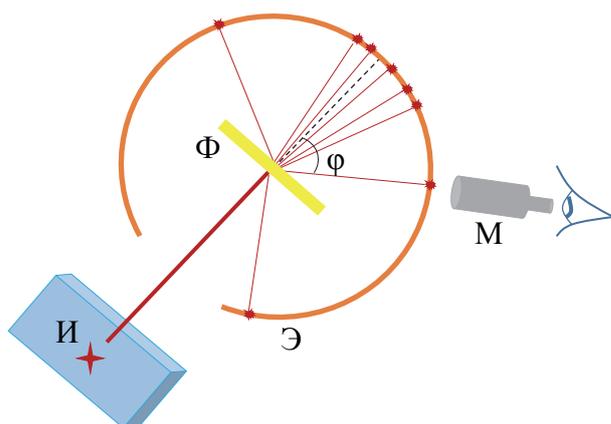


Рис. 1.1

элементарному заряду  $q = +2e$ . Скорость испускаемых радиоактивным препаратом альфа-частиц очень велика – около  $10^7$  м/с.

Резерфорд бомбардировал  $\alpha$ -частицами атомы тяжелых элементов (платину, золото, серебро, медь и др.). Электроны, входящие в состав атомов, вследствие малой массы не могут заметно изменить траекторию  $\alpha$ -частицы. Рассеяние,

т. е. изменение направления движения  $\alpha$ -частиц, может вызвать только тяжелая положительно заряженная часть атома. Схема опыта Резерфорда показана на рис. 1.1.

От радиоактивного источника И, заключенного в свинцовый контейнер,  $\alpha$ -частицы направлялись на тонкую металлическую фольгу Ф. Рассеянные частицы попадали на экран Э, покрытый слоем кристаллов сульфида цинка, способных светиться под ударами быстрых заряженных частиц. Сцинтилляции (вспышки) на экране наблюдались глазом с помощью микроскопа М. Наблюдения рассеянных  $\alpha$ -частиц в опыте проводили под различными углами  $\varphi$  к первоначальному направлению пучка. Было обнаружено, что большинство  $\alpha$ -частиц проходит через тонкий слой металла, практически не испытывая отклонения. Для них углы рассеяния были порядка  $1\text{--}3^\circ$ . Однако, наблюдались также отдельные  $\alpha$ -частицы, отклоняющиеся на большие углы, доходившие до  $150^\circ$ . Относительное число таких частиц было ничтожно. Например, при прохождении пучка  $\alpha$ -частиц через платиновую фольгу из 8000 падающих частиц в среднем только одна частица отклонялась на угол, превышающий  $90^\circ$ . Этот результат был совершенно неожиданным. «Это почти столь же невероятно, говорил Резерфорд, – как если бы вы выстрелили 15-дюймовым снарядом в кусок тонкой бумаги, а снаряд возвратился бы к вам и нанес вам удар». Резерфорд сделал вывод, что каждое большое отклонение появляется в результате единичного акта взаимодействия какого-то практически точечного силового центра с близко пролетающей  $\alpha$ -частицей. Таким силовым центром и является положительно заряженное ядро атома. Электростатическое отталкивание между ядром

и  $\alpha$ -частицей и вызывает рассеяние их на большие углы (рис. 1.2). Изучая распределение рассеянных  $\alpha$ -частиц по углам, Резерфорд смог оценить размеры ядра.

Находиться в состоянии покоя вокруг ядра электроны не могут, так как из-за сил электростатического притяжения между ядром и электронами они упали бы на ядро.

Поэтому Резерфорд естественно пришел к *планетарной модели атома* (рис. 1.3), в которой электроны вращаются вокруг ядра подобно планетам, вращающимся вокруг Солнца.

Планетарная модель атома представляется совершенно необходимой для объяснения опытов по рассеянию  $\alpha$ -частиц. Однако она не способна объяснить сам факт сколько-нибудь продолжительного существования атома, т. е. его устойчивость. В самом деле, согласно законам классической электродинамики, движущийся с ускорением заряд излучает уносящие энергию электромагнитные волны. Электроны при движении вокруг ядра обладают центростремительным ускорением. Поэтому при движении они должны непрерывно излучать электромагнитные волны. В результате потери энергии на излучение радиус орбиты электронов должен непрерывно уменьшаться и в конце концов электроны должны упасть на ядро, т. е. с точки зрения классической физики атом в виде планетарной системы вообще существовать не может.

Кроме того, с точки зрения классической физики частота излучения атома должна совпадать с частотой обращения электронов и содержать также частоты, кратные этой основной частоте. При излучении радиус орбиты электрона изменяется непрерывно, как следствие, должна изменяться и частота излучения, причем также непрерывным образом. Такой характер спектра излучения атома находится в полном противоречии с наблюдаемыми закономерностями атомных спектров, которые являются линейчатыми.

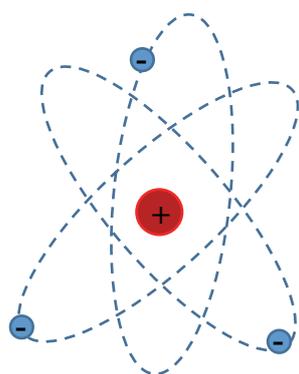


Рис. 1.3

*Линейчатый спектр* состоит из ряда закономерно расположенных спектральных линий определенной частоты (или длины волны). Заметим, что изучение атомных спектров послужило ключом к познанию строения атомов.

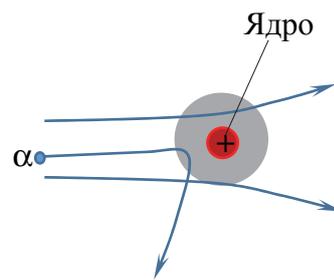


Рис. 1.2

Таким образом, с одной стороны, опыты Резерфорда подтверждают планетарную модель атома. С другой стороны, исходя из планетарной модели атома и пользуясь представлениями классической физики, оказалось невозможным объяснить ни устойчивость атомов, ни характер атомных спектров. Необходимо было ввести в физику новые представления, отличные от классических, способные объяснить наблюдаемые на опыте закономерности. Этот революционный шаг был сделан Н. Бором.

## § 1.2. Постулаты Бора

В основе модели Бора лежала идея связать в единое целое ядерную модель атома Резерфорда и эмпирические закономерности линейчатых спектров атомов. В этой модели не содержалось принципиального отказа от описания поведения электрона в атоме при помощи законов классической физики. Такое описание сохранялось. Однако для достижения тех целей, которые поставил перед собой Бор, ему пришлось классическое описание дополнить некоторыми ограничениями, накладываемыми на возможные состояния электрона в атоме. Эти ограничения были сформулированы в виде постулатов.

*Первый постулат Бора (постулат стационарных состояний).* Атомы могут длительное время находиться не во всех состояниях, допускаемых классической механикой, а только в определенных (квантовых) состояниях, характеризующихся определенными дискретными значениями энергий  $E_1, E_2, E_3, \dots$ . В этих состояниях атомы не излучают и не поглощают энергию, поэтому они называются *стационарными состояниями*.

*Второй постулат Бора.* Излучение или поглощение атомом энергии происходит при изменении его стационарного состояния. Так, при переходе из стационарного состояния с большей энергией  $E_n$  в стационарное состояние с меньшей энергией  $E_m$  происходит излучение одного фотона с энергией

$$\varepsilon = h\nu = E_n - E_m, \quad (1.1)$$

где  $h$  – постоянная Планка;  $\nu$  – частота излучения.

Набор возможных дискретных значений частот  $\nu$ , получающихся из (1.1) при переходе атома из различных стационарных состояний, определяет линейчатый спектр атома. Заметим, что соотношение (1.1) справедливо и для случая поглощения, когда поглощенный фотон

с энергией  $\epsilon$  переводит атом из состояния с меньшей энергией в состояние с большей энергией.

Существует множество экспериментальных фактов, подтверждающих постулаты Бора для различных атомных систем. Например, на основе этих постулатов Бору удалось рассчитать согласующиеся с экспериментом спектры атома водорода и водородоподобных систем.

### § 1.3. Энергии стационарных состояний водородоподобных систем

Атом водорода является простейшим атомом, содержащим только один электрон, заряд которого  $q_e = -e$ . Заряд ядра атома водорода  $q_y = +e$ . Водородоподобные системы – это ионы, электронная оболочка которых также содержит один электрон, а заряд их ядра  $q_y = +Ze$ , где  $Z$  называют зарядовым числом ядра (целое число). При  $Z = 1$  водородоподобная система представляет собой нейтральный атом водорода  $H$ , при  $Z = 2$  – однократно ионизированный атом гелия  $He^+$ , при  $Z = 3$  – дважды ионизированный атом лития  $Li^{++}$  и т. д.

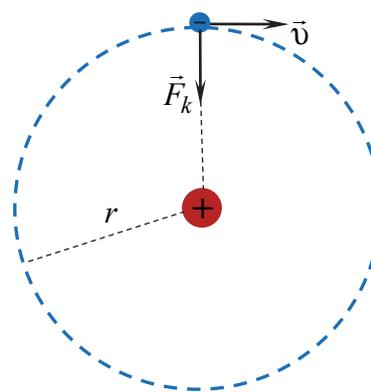


Рис. 1.4

Электрон вращается вокруг ядра по окружности радиуса  $r$  со скоростью  $v$  (рис. 1.4). Масса ядра на много больше массы электрона, поэтому его можно считать неподвижным. На электрон со стороны ядра действует кулоновская сила притяжения, модуль которой равен

$$F_k = k \frac{|q_e| |q_y|}{r^2} = k \frac{Ze^2}{r^2}, \quad (1.2)$$

где  $k$  – коэффициент пропорциональности в законе Кулона.

Эта сила сообщает электрону центростремительное ускорение:

$$a = \frac{v^2}{r}. \quad (1.3)$$

По второму закону Ньютона ( $F = ma$ ) найдем

$$k \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}, \quad (1.4)$$

где  $m$  – масса электрона.

Из (1.4) следует, что кинетическая энергия электрона

$$K = \frac{mv^2}{2} = k \frac{Ze^2}{2r}. \quad (1.5)$$

Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром определяется по формуле

$$\Pi = k \frac{q_{\text{э}} q_{\text{я}}}{r} = -k \frac{Ze^2}{r}. \quad (1.6)$$

Полная энергия атома складывается из кинетической энергии электрона (1.5) и потенциальной энергии взаимодействия (1.6):

$$E = K + \Pi = -k \frac{Ze^2}{2r}. \quad (1.7)$$

Стационарным состояниям атома соответствуют определенные значения радиусов орбит электрона. Чтобы удовлетворить экспериментальным данным, Бор предложил *правило квантования* стационарных орбит. Согласно этому правилу, стационарным состояниям соответствуют те орбиты, при движении по которым момент импульса электрона  $L$  равен целому числу  $n$ , умноженному на постоянную Планка  $\hbar = h / 2\pi$ :

$$L = mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.8)$$

Из (1.8) следует, что

$$mv^2 = \frac{n^2 \hbar^2}{mr^2}. \quad (1.9)$$

Подставляя (1.9) в (1.4), найдем радиусы стационарных орбит электрона:

$$r_n = a_0 n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.10)$$

где  $a_0$  называют *первым боровским радиусом*

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{mZe^2k}. \quad (1.11)$$

Для атома водорода ( $Z = 1$ )  $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}$  м.

Учитывая (1.10) и (1.11) в (1.7), найдем энергии стационарных состояний атома:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.12)$$

где энергия первого стационарного состояния ( $n = 1$ )

$$E_1 = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2\hbar^2}. \quad (1.13)$$

Для атома водорода ( $Z = 1$ )  $E_1 = -13,55$  эВ.

Из формулы (1.12) следует, что энергии стационарных состояний атома являются дискретными и отрицательными. Возможное значение энергии атома называют *энергетическим уровнем*, а целое число  $n$ , определяющее энергетические уровни атома, – *главным квантовым числом*. Стационарное состояние, соответствующее энергетическому уровню с  $n = 1$ , является *основным* состоянием, а состояния с  $n > 1$  – *возбужденными* состояниями. Основное состояние атома имеет наименьшую энергию. В спектроскопии уровни энергии принято изображать горизонтальными линиями (см. например рис. 1.6, на котором схематически показаны уровни энергии атома водорода). При увеличении значения  $n$  уровни энергии сгущаются к своему предельному значению  $E_\infty = 0$ , соответствующему  $n = \infty$ .

## § 1.4. Спектр атома водорода

Согласно второму постулату Бора, излучение или поглощение атома происходит при переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую. При этом будет изменяться стационарное состояние атома. Поглощая квант энергии, электрон переходит с ниже лежащей орбиты на орбиту большего радиуса. При этом энергия атома увеличивается. Обратный переход из состояния с большей энергией в состояние с низшей энергией приводит к излучению атома. Радиус орбиты при этом уменьшается. На рис. 1.5 схематически показаны круговые стационарные орбиты и возможные переходы электрона с одной орбиты на другую при поглощении и излучении атомом.

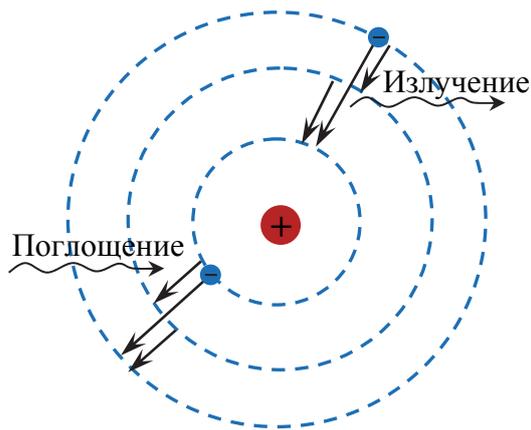


Рис. 1.5

Из второго постулата Бора следует, что частота излучения атома определяется по формуле

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h}, \quad n > m. \quad (1.14)$$

Подставляя в формулу (1.14) выражения для энергий стационарных состояний (1.12) с учетом (1.13) для атома водорода ( $Z = 1$ ), найдем его частоту излучения:

$$\nu = R \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m, \quad (1.15)$$

где  $R$  – постоянная, называемая *постоянной Ридберга*.

$$R = \frac{|E_1|}{h} = \frac{k^2 e^4 m}{4\pi\hbar^3} = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}. \quad (1.16)$$

Формула (1.15), полученная на основе постулатов Бора, правильно описывает наблюдаемый на эксперименте спектр атома водорода. Отдельные линии в спектре излучения объединяют в группы линий, которые принято называть *сериями*. Различные серии в спектре излучения атома водорода образуются в результате перехода электрона с внешних орбит на определенную внутреннюю орбиту.

На рис. 1.6 изображены уровни энергии стационарных состояний атома водорода. Стрелками указаны переходы, соответствующие излучению спектральных линий различных серий. *Серия Лаймана* излучается в результате переходов атома из возбужденных состояний в основное. В формуле (1.15) этим переходам соответствуют числа  $m = 1$  и  $n = 2, 3, 4, \dots$ . Все линии данной серии находятся в ультрафиолетовом диапазоне. *Серия Бальмера*

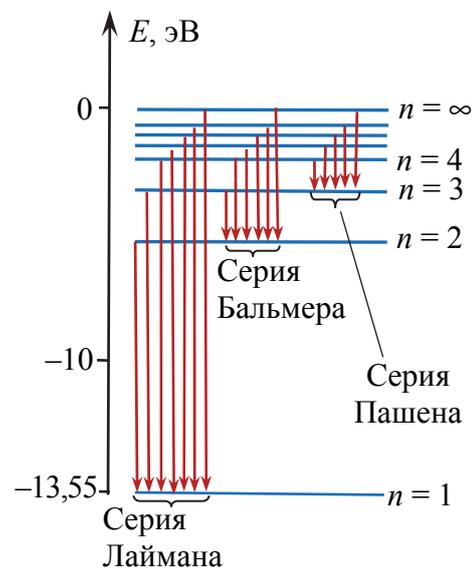


Рис. 1.6

соответствует переходам в первое возбужденное состояние ( $m = 2$ ) с вышележащих уровней энергии ( $n = 3, 4, 5, \dots$ ). Первые четыре линии этой серии находятся в видимом диапазоне, а оставшиеся – в ультрафиолетовом. Другие серии линий атома водорода принадлежат инфракрасной части спектра. *Серия Пашена* соответствует переходам с вышележащих уровней на второй возбужденный уровень с  $m = 3$ , *серия Брэкетта* – на третий возбужденный уровень энергии с  $m = 4$ , *серия Пфунда* – на четвертый возбужденный уровень энергии с  $m = 5$ , *серия Хэмфри* – на пятый возбужденный уровень энергии с  $m = 6$ , *серия Хансена-Стронга* – на шестой возбужденный уровень энергии с  $m = 7$ . На рис. 1.6 последние четыре серии не показаны.

Если атом поглощает энергию извне, то энергия электрона увеличивается, и он переходит на более внешнюю орбиту. Если сообщенная энергия достаточна велика, то электрон может перейти на орбиту с  $n = \infty$ , т. е. покинуть пределы атома. В результате этого атом ионизируется. Энергия, необходимая для этого, называется *энергией ионизации*. Из формул (1.12) и (1.13) следует, что энергия ионизации атома водорода ( $Z = 1$ ) в основном состоянии ( $n = 1$ ) равна, эВ,

$$E_{\text{ион}} = \frac{k^2 e^4 m}{2\hbar^2} = 13,55. \quad (1.17)$$

Это теоретическое значение для энергии ионизации находится в хорошем согласии со значением, полученным в результате экспериментальных измерений.

## § 1.5. Недостатки теории Бора

Теория Бора – важный этап в понимании внутриатомных явлений. Классическая физика, созданная при изучении макроскопических явлений, оказалась не способной объяснить новые квантовые закономерности, с которыми столкнулась физика при изучении явлений микромира. Ценность теории Бора, которая сохраняется и до настоящего времени, заключается в том, что, не давая всегда достаточно точных и надежных результатов, она позволяет отчетливо классифицировать и качественно интерпретировать многие явления. На их основе, например, был классифицирован громадный эмпирический материал атомной и молекулярной спектроскопии.

Однако с самого начала выявились существенные недостатки теории Бора. Даже в простейшем случае одноэлектронных атомов она позволяла вычислять только частоты спектральных линий, но не их интенсивности и поляризацию. Попытки построить в рамках теории Бора теорию атома гелия, простейшего после водорода атома, окончились неудачей. Она тем более не могла дать принципиального решения и более сложного вопроса – образования молекул, даже простейшей молекулы водорода, состоящей из двух протонов и двух электронов. Наконец, теория Бора не могла объяснить дифракцию частиц.

Основной принципиальный недостаток теории Бора – в ее непоследовательности. Прежде всего эта теория не была ни последовательно классической, ни последовательно квантовой, а была полуклассической, полуквантовой теорией. Она принимала существование только стационарных состояний. Это совершенно непонятно с точки зрения классической механики. В то же время к движению электронов в стационарных состояниях она применяла законы классической механики, хотя и считала неприменимой классическую электродинамику, так как в стационарных состояниях нет излучения.

Два постулата Бора, если не пользоваться представлением об орбитах электронов в атомах, проверены экспериментально и потому должны считаться правильными. Но сама теория Бора является очень важным, но все же переходным этапом от классической к последовательной квантовой механике.

## Глава 2 ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

*Квантовая механика* – теория физических явлений и процессов микромира. Под микромиром понимают объекты, линейные размеры которых порядка  $10^{-13} \div 10^{-6}$  см. Квантовая механика описывает свойства атомов и молекул, механизмы излучения и поглощения электромагнитных волн и другие явления. Принципы, лежащие в основе квантовой механики, являются обобщением экспериментальных фактов о квантовании, т. е. дискретности значений некоторых физических величин, характеризующих свойства объектов микромира.

### § 2.1. Волновые свойства частиц. Гипотеза де-Бройля

Как известно, свет (электромагнитное излучение) обнаруживает как корпускулярные (квантовые), так и волновые свойства. В одних явлениях свет ведет себя как поток частиц (корпускул), в других явлениях свет проявляет волновые свойства. Двойственная природа света получила название *корпускулярно-волнового дуализма* и явилась исходным пунктом для становления квантовой механики.

В начале прошлого века Луи де-Бройль, опираясь на представления о симметрии свойств в природе, выдвинул и развил идею о том, что любые объекты микромира (электрон, протон, атом, молекула и т. д.) наряду с корпускулярными свойствами должны обладать и волновыми. Таким образом, с каждым микрообъектом связывается волновой процесс, который получил название *волны де-Бройля*. С каждым объектом связаны, с одной стороны, корпускулярные характеристики – энергия  $E$ , импульс  $p$ , а с другой стороны, волновые характеристики – частота  $\nu$ , длина волны  $\lambda$ . Согласно де-Бройлю, количественные соотношения, связывающие корпускулярные и волновые характеристики частиц, такие же, как для света.

Энергия частицы  $E$  прямо пропорциональна частоте  $\nu$  волнового процесса:

$$E = h\nu, \quad (2.1)$$

где  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – постоянная Планка.

Импульс фотона (кванта света), а значит и любой частицы, определяется соотношением

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \quad (2.2)$$

где  $\lambda = c / \nu$  – длина волны волнового процесса, которую называют *длиной волны де-Бройля*;  $c$  – скорость света в вакууме.

Гипотеза де-Бройля была подтверждена в экспериментах К. Дэвиссона и Л. Джермера, Г. Томсона, П. С. Тарковского и других, наблюдавших дифракционную картину при рассеянии пучка частиц на кристаллах. Таким образом, экспериментально было доказано, что волновые свойства являются универсальным свойством всех частиц. Они не обусловлены какими-то особенностями внутреннего строения той или иной частицы, а отражают их общий закон движения.

Волновые и корпускулярные представления о свойствах объекта микромира дополняют друг друга. Связь между волнами и частицами может быть истолкована только статистически.

## § 2.2. Соотношения неопределенностей Гейзенберга

В. Гейзенберг, учитывая волновые свойства микрообъектов и связанные с волновыми свойствами ограничения в их поведении, пришел к выводу, что объекты микромира невозможно одновременно с любой наперед заданной точностью характеризовать координатой и импульсом. Физическая причина этого заключается в том, что измерительный прибор привносит неконтролируемое воздействие на микрообъект. Нельзя точно предсказать состояние физической системы после процесса измерения. Известна лишь вероятность того, что система находится в некоторых динамических состояниях, соответствующих тем или иным значениям ее параметров. Точность измерения координаты и импульса определяется соотношениями неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar, \quad (2.3)$$

где  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  – неопределенности пространственных координат;  $\Delta p_x$ ,  $\Delta p_y$ ,  $\Delta p_z$  – неопределенности проекций импульса микрообъекта

на координатные оси. Неопределенности  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  и  $\Delta p_x$ ,  $\Delta p_y$ ,  $\Delta p_z$  не являются обычными ошибками измерений, источник которых – несовершенство измерительных приборов и методик измерений, не позволяющие с идеальной точностью фиксировать измеряемые величины. Эти отклонения обусловлены квантовой природой микрообъектов.

Из соотношения неопределенностей следует, что если частица находится в состоянии с точным значением координаты ( $\Delta x = 0$ ), то в этом состоянии соответствующая проекция ее импульса оказывается совершенно неопределенной ( $\Delta p_x \rightarrow \infty$ ), и наоборот. Таким образом, для микрочастицы не существует состояний, в которых ее координаты и импульс имели бы одновременно точные значения. Как следствие, в квантовой механике теряет смысл понятие траектории движения частицы, так как движение по траектории характеризуется в любой момент времени определенными значениями координат и скорости. Учитывая, что неопределенность импульса связана с неопределенностью скорости  $\Delta v_x$  соотношением  $\Delta p_x = m\Delta v_x$ , из (2.3) найдем

$$\Delta x \Delta v_x \gtrsim \frac{\hbar}{m}. \quad (2.4)$$

Из этого соотношения следует, что чем больше масса частицы, тем меньше неопределенности координаты и скорости и, следовательно, с тем большей точностью можно применять к этой частице понятие траектории.

В квантовой механике рассматривается также соотношение неопределенностей для энергии и времени, которое имеет вид

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar, \quad (2.5)$$

где  $\Delta E$  – неопределенность энергии некоторого состояния;  $\Delta t$  – промежуток времени в течение которого оно существует. Следовательно, система, имеющая среднее время жизни  $\Delta t$ , не может быть охарактеризована определенным значением энергии.

## § 2.3. Волновая функция и ее статистический смысл

В квантовой механике задача состоит не в точном предсказании событий, а в определении их вероятностей. По значениям вероятности, используя определенные правила, можно найти средние

значения случайных физических величин, которые доступны измерению.

В квантовой механике состояния микрочастиц описываются с помощью *волновой функции*  $\psi(x, y, z, t)$ , которая является основным носителем информации об их корпускулярных и волновых свойствах. Волновая функция является комплексной величиной и позволяет находить все вероятности в квантовой механике.

Например, вероятность  $dP$  частице находиться в объеме  $dV$  в момент времени  $t$  определяется соотношением

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi\psi^* dV, \quad (2.6)$$

где  $\psi^*$  – комплексно-сопряженная функция. Тогда плотность вероятности, т. е. вероятность нахождения частицы в единице объема,

$$f = \frac{dP}{dV} = |\psi|^2 = \psi\psi^*. \quad (2.7)$$

Плотность вероятности является экспериментально наблюдаемой величиной, в то время как сама волновая функция  $\psi$ , будучи комплексной, недоступна наблюдению.

Волновая функция, вообще говоря, определяется с точностью до произвольного постоянного множителя. Это не влияет на состояние частицы, которое она описывает. Волновую функцию выбирают так, чтобы она удовлетворяла условию нормировки:

$$\int |\psi|^2 dV = \int \psi\psi^* dV = 1, \quad (2.8)$$

где интеграл берется по всему пространству. Условие нормировки (2.8) означает, что вероятность найти частицу во всем пространстве равна единице, т. е. представляет собой достоверное событие. Волновую функцию, удовлетворяющую условию (2.8), называют *нормированной*.

Волновая функция удовлетворяет *принципу суперпозиции*: если система может находиться в различных состояниях, описываемых волновыми функциями  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ , то она также может находиться в состоянии  $\psi$ , описываемом линейной комбинацией этих функций:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n, \quad (2.9)$$

где  $c_1, c_2, \dots, c_n$  – некоторые постоянные комплексные коэффициенты.

Волновая функция, являясь основной характеристикой микроробъекта, позволяет в квантовой механике вычислять средние значения

физических величин, характеризующих данный микрообъект. Например, среднее расстояние электрона от ядра в атоме определяется по формуле

$$\langle r \rangle = \int r |\psi|^2 dV = \int r \psi \psi^* dV, \quad (2.10)$$

где  $\psi$  – волновая функция электрона в атоме.

## § 2.4. Уравнение Шредингера

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, которое управляет изменением состояния системы, т. е. изменением волновой функции, сформулировано Шредингером. Это уравнение, как и все основные уравнения физики (например, уравнение Ньютона в классической механике), не выводится, а постулируется. Правильность данного уравнения подтверждается согласием с опытом получаемых с его помощью результатов, что, в свою очередь, придает ему характер закона природы. Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x, y, z) \psi, \quad (2.11)$$

где  $i = \sqrt{-1}$  – мнимая единица;  $\hbar = h/2\pi$  – постоянная Планка;  $m$  – масса частицы;  $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$  – оператор Лапласа;  $U(x, y, z)$  – потенциальная энергия частицы в силовом поле, в котором она движется. Уравнение (2.11) называют *временным уравнением Шредингера*.

Особую роль в квантовой теории играют *стационарные состояния* – состояния, в которых все наблюдаемые физические величины не меняются с течением времени. В стационарных состояниях волновая функция имеет вид

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (2.12)$$

где  $\varphi(x, y, z)$  – волновая функция стационарных состояний;  $E$  – полная энергия частицы, постоянная в случае стационарного состояния.

При таком виде волновой функции плотность вероятности (2.7) остается постоянной. Действительно,

$$f = \psi \psi^* = \varphi(x, y, z) \varphi^*(x, y, z). \quad (2.13)$$

Для нахождения волновой функции  $\varphi(x, y, z)$  в стационарных состояниях подставим (2.12) в уравнение (2.11) и получим

$$\Delta\varphi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\varphi = 0. \quad (2.14)$$

Уравнение (2.14) называют *уравнением Шредингера для стационарных состояний*.

Волновая функция должна удовлетворять естественным, или стандартным, условиям. Эти условия состоят в том, что волновая функция должна быть конечной, однозначной, непрерывной и гладкой (без изломов) во всем пространстве, даже в тех точках, в которых потенциальная энергия  $U$  терпит разрыв. Решения уравнения (2.14), удовлетворяющие этим условиям, оказываются возможными лишь при некоторых значениях энергии  $E$ . Их называют *собственными значениями*, а функции  $\varphi$ , являющиеся решением уравнения (2.14) при этих значениях энергии, называют *собственными функциями*. Значения энергии могут быть дискретными (квантованными) или непрерывными, образуя дискретный или непрерывный энергетический спектр.

Рассмотрим несколько простейших случаев применения уравнения Шредингера (2.14) к решению некоторых задач квантовой механики.

## § 2.5. Движение свободной частицы

*Свободная частица* – это частица, движущаяся в отсутствии внешних полей ( $U = 0$ ). Ограничимся рассмотрением движения частицы вдоль оси  $x$ . Стационарные состояния частицы описываются волновой функцией  $\varphi(x)$ , удовлетворяющей уравнению Шредингера для стационарных состояний (2.14), которое в данном случае имеет вид

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi = 0. \quad (2.15)$$

Решение уравнения (2.15) следующее:

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (2.16)$$

где  $A$  и  $B$  – произвольные постоянные. Первое слагаемое в (2.16) описывает движение частицы в положительном направлении оси  $x$ , а второе – в противоположном направлении.

Рассматривая для определенности движение частицы в положительном направлении, необходимо положить  $B = 0$ . Тогда на основании (2.12) волновая функция, зависящая от времени, имеет вид

$$\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = Ae^{-i(\omega t - kx)}. \quad (2.17)$$

Функция (2.17) представляет собой плоскую монохроматическую волну де-Бройля, где частота волны  $\omega$  и волновое число  $k$  определены в (2.12) и (2.16).

Из выражения для волнового числа  $k$  в (2.16) следует, что энергия свободной частицы определяется соотношением

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.18)$$

Из (2.18) следует, что энергия свободной частицы может принимать любые значения, так как на волновое число  $k$  не накладывается никаких ограничений. Таким образом, энергетический спектр свободной частицы является непрерывным.

Используя (2.7) и (2.17), плотность вероятности обнаружить частицу в какой-либо точке пространства

$$f = |\psi|^2 = \psi\psi^* = |A|^2. \quad (2.19)$$

Плотность вероятности (2.19) не зависит от времени, и все положения частицы являются равновероятными.

## § 2.6. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме

Рассмотрим поведение частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме шириной  $l$  с бесконечно высокими стенками (рис. 2.1). Потенциальная энергия в этом случае определяется соотношением

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 \leq x \leq l, \\ \infty, & x > l. \end{cases} \quad (2.20)$$

Частица не может проникнуть за пределы ямы, так как стенки ямы бесконечно высоки. Поэтому вероятность обнаружить ее, а следовательно, и волновая функция за пределами ямы равны нулю.

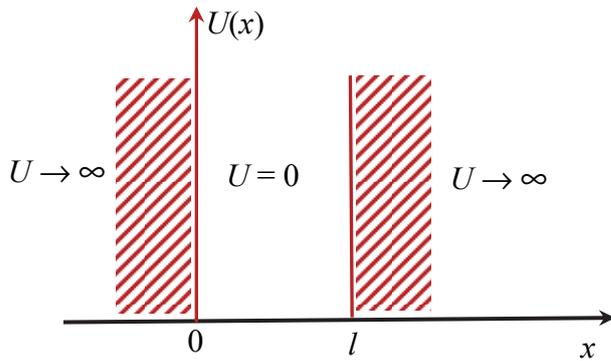


Рис. 2.1

Так как волновая функция должна быть непрерывной, то на границах ямы при  $x = 0$  и  $x = l$  она должна обращаться в ноль:

$$\varphi(0) = \varphi(l) = 0. \quad (2.21)$$

В пределах ямы  $U = 0$  и одномерное стационарное уравнение Шредингера (2.14) имеет вид

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi = 0. \quad (2.22)$$

Общее решение уравнения (2.22) определяется соотношением

$$\varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.23)$$

Из (2.23) при  $x = 0$ , учитывая (2.21), получим  $\varphi(0) = B = 0$ . Тогда

$$\varphi(x) = A \sin kx. \quad (2.24)$$

Из второго граничного условия (2.21) и (2.24) следует, что

$$\varphi(l) = A \sin kl = 0. \quad (2.25)$$

Отсюда найдем

$$k = \frac{\pi n}{l}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.26)$$

Учитывая (2.26) в формуле для волнового числа  $k$  в (2.23), найдем выражение для энергии частицы, находящейся в яме:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

Таким образом, энергия частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками принимает лишь определенные дискретные значения, т. е. квантуется. Из (2.27) следует, что частица не может иметь энергию меньшую, чем минимальная энергия при  $n = 1$ :

$$E_{\min} = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}. \quad (2.28)$$

Это полностью согласуется с соотношениями неопределенностей. У частицы в яме ограничена область возможных значений ее координаты, поэтому должен существовать разброс по импульсам, а значит, должна быть отличная от нуля энергия.

Подставляя (2.26) в (2.24), найдем волновые функции, отвечающие данным стационарным состояниям:

$$\varphi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.29)$$

Постоянную  $A$  в (2.29) определим из условия нормировки волновой функции (2.8):

$$\int_0^l |\varphi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^l \sin^2 \left( \frac{n\pi}{l} x \right) dx = A^2 \frac{l}{2} = 1. \quad (2.30)$$

Отсюда  $A = \sqrt{2/l}$ . Таким образом, волновые функции для стационарных состояний в данном случае имеют вид

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.31)$$

Из (2.31) следует, что в низшем энергетическом состоянии при  $n = 1$  волновая функция имеет один максимум при  $x = l/2$ . Поэтому с наибольшей вероятностью частицу можно обнаружить в середине ямы, а вероятность ее нахождения вблизи краев весьма мала. Такое поведение частицы резко отличается от поведения классической частицы. С увеличением энергии (т. е. с увеличением квантового числа  $n$ ) число максимумов функции (2.31) увеличивается. Как следствие – распределение частицы стремится к равномерному распределению и частица начинает вести себя совсем «по-классически».

## § 2.7. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

*Потенциальным барьером* называется область пространства, в которой потенциальная энергия больше, чем в окружающих областях

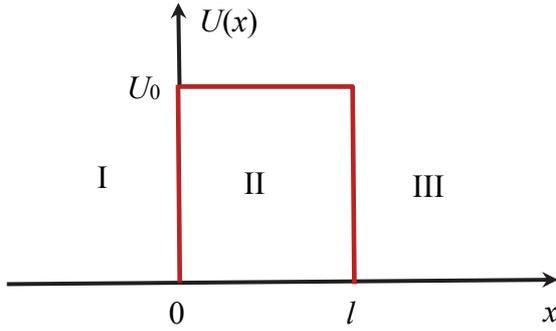


Рис. 2.2

пространства. Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высоты  $U_0$  и ширины  $l$  (рис. 2.2). Потенциальная энергия в этом случае имеет вид

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & 0 \leq x \leq l, \\ 0, & x > l. \end{cases} \quad (2.32)$$

Классическая частица, обладая энергией  $E$ , либо беспрепятственно пройдет над барьером, если  $E > U_0$ , либо отразится от него и будет двигаться в противоположную сторону, если  $E < U_0$ , т. е. она не может проникнуть за барьер в область, в которой ее энергия меньше потенциальной энергии.

Для микрочастицы же, даже при  $E > U_0$ , имеется отличная от нуля вероятность, что частица отразится от барьера и будет двигаться в обратную сторону. При  $E < U_0$  имеется также отличная от нуля вероятность, что частица окажется в области  $x > l$ , т. е. частица проникнет сквозь барьер. Эти выводы следуют непосредственно из уравнения Шредингера.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний (2.14) в различных областях, обозначенных на рис. 2.2, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi = 0, \text{ для областей I и III;} \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \varphi = 0, \text{ для области II.} \quad (2.34)$$

Общее решение этих дифференциальных уравнений имеет следующий вид:

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \text{ для области I;} \quad (2.35)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}, \text{ для области II;} \quad (2.36)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, \text{ для области III,} \quad (2.37)$$

где

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}. \quad (2.38)$$

Постоянные  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$  в решениях определяются из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границах барьера при  $x = 0$  и  $x = l$ .

В решении (2.35) первое слагаемое соответствует падающей на барьер волне, а второе слагаемое – волне, отраженной от барьера. В области III имеется только прошедшая волна, поэтому  $B_3 = 0$  в (2.37).

Рассмотрим для определенности случай  $E < U_0$ . В этом случае

$$q = i\alpha, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}. \quad (2.39)$$

Для не слишком низкого барьера ( $\alpha l \gg 1$ ), т. е. если барьер высок и широк,  $B_2 \approx 0$  в (2.36). Таким образом, решение уравнений Шредингера примет вид

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad \text{для области I;} \quad (2.40)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{-\alpha x}, \quad \text{для области II;} \quad (2.41)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx}, \quad \text{для области III.} \quad (2.42)$$

Слева от барьера имеются падающая и отраженные волны, а за барьером только прошедшая волна. Внутри барьера волновая функция имеет неволновой характер, в результате чего плотность вероятности убывает экспоненциально.

Таким образом, квантовая механика приводит к принципиально новому квантовому явлению, получившему название *туннельного эффекта*, в результате которого микрообъект может как бы по туннелю пройти сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект – специфическое квантовое явление, не имеющее аналога в классической физике (где такого в принципе быть не может).

Для описания туннельного эффекта используют понятие коэффициента прозрачности  $D$  потенциального барьера, определяемого как отношение плотности потока прошедших частиц к плотности потока падающих частиц. Для прямоугольного потенциального барьера

$$D \approx \exp\left(-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right). \quad (2.43)$$

Этим эффектом объясняются многие физические явления, например холодная эмиссия электронов из металлов, альфа-распад, спонтанное деление ядер и др.

# Глава 3 СОВРЕМЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О СТРОЕНИИ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

## § 3.1. Водородоподобная система в квантовой механике

Стационарные состояния электрона в водородоподобной системе описываются волновой функцией  $\varphi$ , которая удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера (2.14) с потенциальной энергией взаимодействия между электроном и ядром (1.6):

$$\Delta\varphi + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + k \frac{Ze^2}{r} \right) \varphi = 0, \quad (3.1)$$

где  $m$  – масса электрона;  $E$  – полная энергия электрона в атоме.

В теории дифференциальных уравнений доказывалось, что уравнение (3.1) имеет решения, удовлетворяющие требованиям однозначности, конечности и непрерывности волновой функции  $\varphi$ , только при собственных значениях энергии:

$$E = E_n = -\frac{k^2 Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.2)$$

Соотношение (3.2) полностью совпадает с формулой (1.12) с учетом (1.13), полученной из теории Бора для водородоподобных систем. Однако, если Бору пришлось вводить дополнительные гипотезы (постулаты), то в квантовой механике дискретные уровни энергии являются следствием самой теории и непосредственно вытекают из решения уравнения Шредингера.

Собственные функции, удовлетворяющие уравнению Шредингера (3.1), зависят от трех квантовых чисел: главного  $n$ , орбитального  $l$  и магнитного  $m_l$ .

Главное квантовое число  $n$  определяет уровни энергии электрона в атоме по формуле (3.2) и принимает целочисленные значения.

Орбитальное квантовое число  $l$  определяет квантование орбитального момента импульса электрона по формуле

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.3)$$

При заданном значении главного квантового числа  $n$  (энергии) орбитальное квантовое число может принимать значения от 0 до  $n-1$ .

Состояния электрона с различными орбитальными моментами импульса имеют специальные названия. Если  $l = 0$ , то говорят, что электрон находится в  $s$ -состоянии, при  $l = 1$  – в  $p$ -состоянии и т. д. (см. табл. 3.1). Электрон, находящийся в состоянии  $n = 2$  и  $l = 0$ , обозначают  $2s$ , в состоянии  $n = 2$  и  $l = 1$  –  $2p$  и т. д.

Таблица 3.1

Орбитальное число $l$	0	1	2	3	4
Состояние	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$

Магнитное квантовое число  $m_l$  определяет возможные значения проекции орбитального момента импульса электрона на избранное направление  $z$ :

$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (3.4)$$

При заданном значении  $l$  магнитное квантовое число  $m_l$  принимает всего  $2l + 1$  значение.

Таким образом, энергия электрона зависит только от главного квантового числа  $n$ , но каждому собственному значению энергии  $E_n$  (кроме  $E_1$ ) соответствует несколько собственных функций, отличающихся значениями  $l$  и  $m_l$ . Следовательно, водородоподобный атом может иметь одно и то же значение энергии, находясь в нескольких различных состояниях. Говорят, что уровни энергии являются *вырожденными*. Число различных состояний, соответствующих данному значению  $n$ , равно

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (3.5)$$

Наличие квантового числа  $m_l$  приводит в магнитном поле к расщеплению уровня энергии с главным квантовым числом  $n$  на

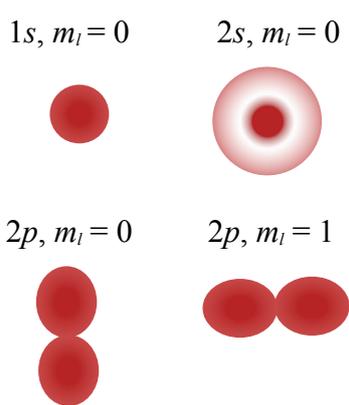


Рис. 3.1

$2l + 1$  подуровней энергии. Это приводит к появлению в спектре атома дополнительных спектральных линий. Данный эффект носит название *эффекта Зеемана*. Он обусловлен тем, что в присутствии магнитного поля электрон приобретает дополнительную энергию, которая снимает вырождение атомных состояний по магнитному квантовому числу.

Согласно квантовой механике, квадрат модуля волновой функции определяет вероятность нахождения частицы в единице объема.

Эта вероятность в различных частях атома различна. Электрон при своем движении как бы «размазан» по всему объему, образуя электронное облако, плотность (густота) которого характеризует вероятность нахождения электрона в различных точках объема атома. Квантовые числа  $n$  и  $l$  характеризуют размер и форму электронного облака, а квантовое число  $m_l$  – ориентацию электронного облака в пространстве. На рис. 3.1 для примера приведено распределение электронной плотности (формы электронного облака) для состояний атома водорода при  $n = 1$  и  $n = 2$ . При  $l = 0$  электронная плотность отлична от нуля в центре и не зависит от направления (сферически-симметрична), а для остальных состояний в центре равна нулю и зависит от направления. Оказывается, что с наибольшей вероятностью электрон может быть обнаружен на расстоянии от центра, равном первому боровскому радиусу (1.11).

Квантовые числа  $n$ ,  $l$  и  $m_l$  позволяют более полно описать спектр испускания (поглощения) водородоподобного атома, полученный в теории Бора.

## § 3.2. Многоэлектронные атомы. Принцип Паули

Проведенный анализ состояний водородоподобных атомов, основанный на решении уравнения Шредингера, является неполным. Опытные данные привели к необходимости характеризовать электроны (и микрочастицы вообще) добавочной внутренней степенью свободы, которую называют *собственным моментом импульса* или *спином*. Спин микрочастиц – квантовая величина, не имеющая классического

аналога. Он является неотъемлемым свойством микрочастицы, подобно ее массе и заряду. Для количественного согласия с экспериментом собственный момент импульса электрона должен быть равен

$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \quad s = \frac{1}{2}, \quad (3.6)$$

где  $s$  – спиновое квантовое число (спин).

Проекция спина на выделенное направление  $z$  может принимать два значения:

$$L_{sz} = m_s \hbar, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}, \quad (3.7)$$

где  $m_s$  – магнитное спиновое число.

Эффекты, связанные со спином, существенны для многоэлектронных систем, и без их учета невозможно полное объяснение многих особенностей этих систем.

Многоэлектронный атом представляет собой систему, состоящую из абсолютно одинаковых частиц – электронов, которые обладают совершенно одинаковыми свойствами: у них одинаковые масса, электрический заряд, спин и пр. Такие системы в квантовой механике подчиняются *принципу тождественности (неразличимости)*: состояния квантовой системы, отличающиеся одно от другого перестановкой одинаковых частиц, следует рассматривать как одно и то же состояние. Другими словами, если одинаковые частицы поменять местами, то результат такого обмена никак нельзя обнаружить экспериментально.

Принцип тождественности частиц ведет к определенному свойству симметрии волновой функции системы. Например, в случае системы двух одинаковых частиц из тождественности частиц следует, что плотность вероятности найти первую частицу в точке 1, а вторую в точке 2 равна плотности вероятности найти вторую частицу в точке 1, а первую частицу в точке 2.

Поэтому

$$|\psi(1, 2)|^2 = |\psi(2, 1)|^2, \quad (3.8)$$

где  $\psi(1,2)$  и  $\psi(2,1)$  – волновые функции системы до и после перестановки частиц.

Из (3.8) следует, что

$$\psi(1, 2) = \pm\psi(2, 1). \quad (3.9)$$

Если волновая функция при перестановке частиц местами не меняет знак, то она называется *симметричной*, а если меняет знак на минус, то *антисимметричной*. Опыт показывает, что свойство симметрии волновой функции многочастичной системы однозначно связано с величиной спина тождественных частиц, составляющих систему. Симметричные волновые функции описывают системы, состоящие из частиц, имеющих целый спин ( $s = 0, 1, 2, \dots$ ) – их называют *бозонами*. Антисимметричными волновыми функциями описываются многочастичные системы, состоящие из частиц с полуцелым спином ( $s = 1/2, 3/2, \dots$ ) – их называют *фермионами*. Бозоном, например, является фотон, а фермионом – электрон.

Обобщая опытные данные, В. Паули сформулировал принцип, который называют *принципом запрета Паули*. Согласно этому принципу, в каждом квантовом состоянии может находиться не более одного фермиона. Заметим, что в произвольном квантовом состоянии может находиться любое число бозонов.

Электроны являются фермионами. Поэтому в определенном возможном квантовом состоянии может быть только один электрон. Состояние отдельного электрона в атоме однозначно определяется набором четырех квантовых чисел: главного квантового числа  $n$ , орбитального квантового числа  $l$ , магнитного квантового числа  $m_l$  и магнитного спинового числа  $m_s$ . Согласно принципу запрета Паули, в одном и том же атоме не может быть более одного электрона с одним набором квантовых чисел  $n, l, m_l, m_s$ . Данному значению  $n$  соответствует  $n^2$  состояний с различными значениями  $l$  и  $m_l$  (3.5). С учетом того, что квантовое число  $m_s$  может принимать два значения (3.7), максимальное число электронов, находящихся в состоянии с определенным значением главного квантового числа  $n$ , равно  $2n^2$ . Совокупность электронов в многоэлектронном атоме, имеющих одно и то же квантовое число  $n$ , называют *электронной оболочкой* или *электронным слоем*. Оболочки обозначаются прописными буквами латинского алфавита (табл. 3.2). В каждой из оболочек электроны распределяются по подоболочкам, соответствующим данному значению орбитального числа  $l$ . Различные состояния в подоболочке отличаются значениями магнитного квантового числа  $m_l$  и магнитного спинового числа  $m_s$ . Учитывая, что  $m_l$  для данного  $l$  принимает  $2l + 1$  значения (3.4) и  $m_s$  два значения (3.7), максимальное число электронов в подоболочке равно  $2(2l + 1)$ . Подоболочки обозначаются строчными буквами латинского алфавита (табл. 3.2).

Таблица 3.2

Показатели	Значения									
	1	2	3		4					
Главное квантовое число $n$	$K$	$L$	$M$		$N$					
Символ оболочки	2	8	18		32					
Максимальное число электронов в оболочке	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3
Орбитальное квантовое число $l$	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$	$4p$	$4d$	$4f$
Символ подоболочки	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14
Максимальное число электронов в подоболочке										

Обозначение, указывающее оболочки, подоболочки и число электронов в каждой подоболочке, называется *электронной конфигурацией* атома. Например, электронная конфигурация неона  $1s^2 2s^2 2p^6$ . Она означает, что в состоянии  $n = 1, l = 0$  находятся два электрона, в состоянии  $n = 2, l = 0$  – также два электрона, а в состоянии  $n = 2, l = 1$  – шесть электронов.

В основе строения электронных оболочек атома лежат два принципа: 1) принцип запрета Паули и 2) *принцип минимума энергии*: при данном общем числе электронов в атоме осуществляется состояние с минимальной энергией. Принцип минимума энергии – естественное требование с точки зрения устойчивости атома. Минимальной энергией обладают электроны на  $K$ -оболочке ( $n = 1$ ), затем на  $L$ -оболочке ( $n = 2$ ) и т. д. Это означает, что оболочки  $K, L, M, \dots$  должны заполняться последовательно, начиная с  $K$ . Когда заполнение оболочки закончено, образуется устойчивая электронная конфигурация, соответствующая электронной конфигурации благородных газов. После этого начинает заполняться следующая оболочка, причем первым элементом является щелочной металл. Химические свойства элементов определяются внешними электронами. При заполнении очередной оболочки повторяется порядок заполнения предыдущей оболочки. Поэтому химические свойства элементов от оболочки к оболочке меняются периодически: заполнение каждой начинается со щелочного металла и заканчивается благородным газом. Следовательно, элементы, образующиеся при заполнении оболочки, составляют период системы Менделеева.

Таким образом, периодическая повторяемость свойств химических элементов является внешним проявлением внутренней структуры электронных оболочек атомов.

### § 3.3. Химические связи атомов в молекулах

*Молекулой* называют наименьшую устойчивую частицу данного вещества, обладающую его основными химическими свойствами. Молекулы состоят из нейтральных атомов, соединенных между собой в одно целое междуатомными связями, которые называют *химическими связями*. Существует два типа химической связи: а) *ионная*; б) *ковалентная*.

Ионная связь реализуется в тех случаях, когда молекулу можно представить как образование, состоящее из двух ионов: положительного и отрицательного, которые притягиваются к друг другу. Типичным представителем молекулы с ионной связью является молекула поваренной соли NaCl. Каким образом два разнородных атома – атом металла натрия и атом газа хлора – образуют устойчивое соединение? Атом натрия имеет один электрон на внешней оболочке, а атом хлора имеет семь электронов на внешней оболочке, где в принципе может находиться восемь электронов, т. е. ему недостает одного электрона до заполнения внешней оболочки. Если один электрон атома натрия передать атому хлора, то и у того, и у другого образуются максимально устойчивые электронные конфигурации из целиком заполненных оболочек. При этом образуются два иона  $\text{Na}^+$  и  $\text{Cl}^-$ , которые притягиваются друг к другу и образуют молекулу NaCl. Ионная связь, возникающая в результате перехода одного или нескольких электронов от одного атома к другому, характерна для соединений, в которых участвуют химические элементы из противоположных концов периода системы Менделеева.

Однако с помощью ионной связи не удастся объяснить строение всех молекул. Например, нельзя понять, почему два нейтральных атома водорода H образуют молекулу  $\text{H}_2$ . Из-за идентичности атомов водорода нельзя считать один ион водорода положительным  $\text{H}^+$ , а другой – отрицательным  $\text{H}^-$ . Подобная связь называется ковалентной. Она не подчиняется классическому объяснению и может быть истолкована лишь квантово-механическими особенностями взаимодействия. Ковалентная связь возникает вследствие обобществления атомами одного или нескольких электронов и характерна для одинаковых или близких по своим химическим свойствам атомам. В результате электростатическое отталкивание ядер, стремящееся развалить молекулу, оказывается меньшим, чем сила притяжения ядер к обобществленным электронам. На рис. 3.2 показана ковалентная связь, формирующая молекулу водорода  $\text{H}_2$  с двумя обобществленными электронами.

Для ковалентной связи характерна определенная направленность и насыщенность. У атома углерода есть четыре электрона, способных

участвовать в образовании ковалентных связей. Простейший пример углеродных соединений дает молекула метана  $\text{CH}_4$ , в которой пространственная направленность ковалентных связей проявляется в том, что четыре атома водорода располагаются в вершинах правильного тетраэдра, в центре которого находится атом углерода (рис. 3.3). Насыщаемость связей проявляется в том, что больше четырех атомов водорода атом углерода присоединить не может.

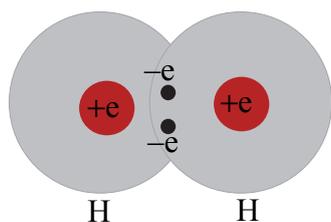


Рис. 3.2

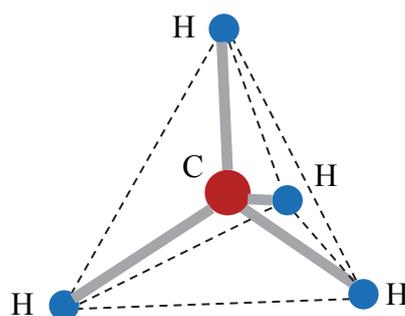


Рис. 3.3

В действительности в природе практически не встречается чисто ионных и чисто ковалентных связей, и можно говорить лишь о преимущественно ионном или ковалентном характере той или иной связи. Преимущественно ковалентная химическая связь характерна для таких молекул, как  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$  и т. д., а также для большинства органических молекул; ионная – для молекул  $\text{Cs}$ ,  $\text{KCl}$ ,  $\text{NaCl}$  и других многочисленных ионных кристаллов.

### § 3.4. Спонтанное и вынужденное излучения. Оптические квантовые генераторы (лазеры)

Согласно квантовой теории, молекулы (атомы) могут находиться лишь в определенных квантовых состояниях с дискретными значениями энергии  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$  и т. д. При отсутствии внешних воздействий подавляющая часть молекул находится в основном состоянии с наименьшим значением энергии  $E_1$ . Под действием внешнего излучения молекулы с более низких уровней энергии могут переходить на более высокие уровни, поглощая излучение (рис. 3.4). Находясь в возбужденном состоянии, атом самопроизвольно, без каких-либо воздействий может

перейти в состояние с низшей энергией, испуская фотон с энергией  $h\nu = E_2 - E_1$ . Процесс испускания излучения без каких-либо внешних воздействий называется *спонтанным (самопроизвольным) излучением*. Именно такие спонтанные процессы излучения и происходят в нагретых телах. Нагрев переводит часть атомов в возбужденное состояние, и при переходе в нижние состояния они излучают свет. Это излучение молекул происходит независимо друг от друга. Кванты света хаотически испускаются молекулами в виде так называемых волновых цугов, которые не согласованы друг с другом во времени и имеют различную фазу. Так как спонтанные переходы молекул взаимно не связаны, то спонтанное излучение является некогерентным.

А. Эйнштейн в 1918 г. для объяснения наблюдаемого на опыте количественного различия между поглощенным и испускаемым излучением пришел к выводу, что существуют переходы с возбужденных уровней энергии на более низкие уровни энергии, сопровождающиеся испусканием фотонов под действием внешнего излучения. Возникающее излучение называют *вынужденным* или *индуцированным*. При подобных переходах происходит вынужденное излучение фотона дополнительно к тому фотону, под действием которого произошел переход (рис. 3.4). Причем вторичные фотоны совершенно неотличимы от первичных. Во-первых, направление вторичных фотонов точно совпадает с направлением вынуждающего излучения, во-вторых, вынужденное излучение имеет такую же частоту, фазу и поляризацию, как и вынуждающее излучение, т. е. индуцированное излучение в высокой степени когерентно с вынуждающим излучением.

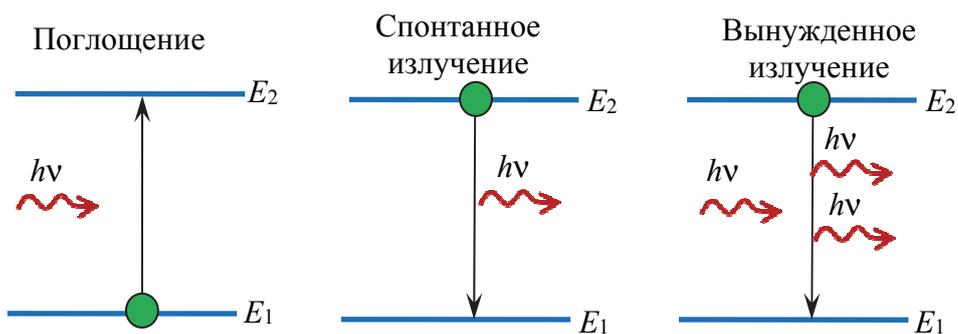


Рис. 3.4

Испущенные при вынужденном излучении фотоны, двигаясь в одном направлении и встречая другие возбужденные молекулы, стимулируют

дальнейшие индуцированные переходы. Число испущенных фотонов растет лавинообразно. Однако существует конкурирующий процесс – поглощение фотона при возбуждении молекулы. При прохождении слоя вещества толщиной  $dx$  интенсивность излучения изменится на величину

$$dI = P_{21}h\nu n_2 dx - P_{12}h\nu n_1 dx, \quad (3.10)$$

где первое слагаемое соответствует вынужденному излучению, а второе – поглощению;  $n_1$  и  $n_2$  – концентрации молекул на уровнях энергии  $E_1$  и  $E_2$ , а  $n_1 dx$  и  $n_2 dx$  – это число таких молекул на единицу площади поверхностного слоя. Каждая из этих молекул или вносит в пучок в единицу времени энергию  $P_{21}h\nu$ , или поглощает энергию  $P_{12}h\nu$ , где  $P_{21}$  и  $P_{12}$  – число переходов в единицу времени с одного уровня на другой в расчете на одну молекулу;  $h\nu$  – энергия одного фотона.

Число переходов  $P_{21}$  и  $P_{12}$  прямо пропорционально интенсивности излучения:

$$P_{21} = \frac{B_{21}}{c} I, \quad P_{12} = \frac{B_{12}}{c} I, \quad (3.11)$$

где  $B_{21}$  и  $B_{12}$  – коэффициенты Эйнштейна.

Исходя из термодинамических соображений Эйнштейн установил, что  $P_{21} = P_{12}$ . Это значит, что коэффициенты

$$B_{21} = B_{12}. \quad (3.12)$$

Подставляя (3.11) в (3.10) с учетом (3.12), найдем

$$dI = -\alpha I dx, \quad (3.13)$$

где

$$\alpha = n_1 B_{12} \left( 1 - \frac{n_2}{n_1} \right) \frac{h\nu}{c}. \quad (3.14)$$

Разделяя переменные в (3.13) и интегрируя, найдем интенсивность излучения при прохождении света вещества толщиной  $x$ :

$$I = I_0 e^{-\alpha x}, \quad (3.15)$$

где  $I_0$  первоначальная интенсивность пучка.

Формула (3.15) по форме совпадает с законом Бугера для поглощения света. Однако коэффициент  $\alpha$  в (3.15), в отличие от такого же коэффициента в законе Бугера, может быть как положительным, так и отрицательным.

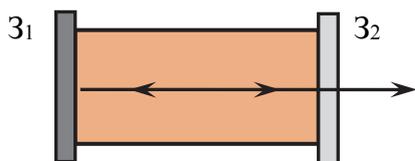


Рис. 3.5

В обычных средах концентрация молекул в возбужденных состояниях меньше чем в основном состоянии  $n_2 < n_1$  и даже с учетом индуцированного излучения коэффициент (3.14)  $\alpha > 0$ . В этом случае из (3.15) следует, что интенсивность пучка уменьшается, излучение поглощается.

Если среду сделать *активной*, чтобы концентрация молекул в возбужденном состоянии оказалось больше, чем в основном  $n_2 > n_1$ , то коэффициент  $\alpha$  (3.14) станет отрицательным  $\alpha < 0$ . Интенсивность излучения увеличивается при прохождении через такую среду. Ее называют *инверсной* средой. Практически инверсное состояние среды осуществлено в источниках излучения – *оптических квантовых генераторах (лазерах)*.

Любой лазер имеет три основных компонента: 1) активную среду; 2) систему накачки (устройство для создания инверсии в активной среде); 3) оптический резонатор (устройство, выделяющее в пространство выходящий световой пучок). В настоящее время в качестве активной среды используют все агрегатные состояния вещества: твердое, жидкое, газообразное, плазму. Разработаны различные системы накачки, использующие оптические, тепловые, химические и другие способы. Генератор не будет действовать без обратной связи, которая заключается в том, что часть усиленного излучения остается в активной среде и подвергается повторному когерентному усилению. Для этого в лазерах используют оптические резонаторы – системы из двух зеркал (рис. 3.5). Индуцированное излучение за счет отражений многократно проходит активную среду. Одно из зеркал ( $Z_2$ ) делают слабо пропускающим для вывода части излучения наружу, в результате чего и формируется лазерный пучок.

Лазерное излучение обладает свойствами, которых нет ни у одного нелазерного источника.

Во-первых, оно отличается высокой степенью монохроматичности. Относительная ширина спектральной линии в излучении лазеров составляет  $\Delta\nu/\nu \sim 10^{-12} \div 10^{-11}$ .

Во-вторых, угол расхождения лазерного пучка очень мал, поэтому интенсивность светового потока почти не убывает с расстоянием. Так, в лучших газовых гелий-неоновых лазерах расходимость пучка достигает 20 угл. сек.

В-третьих, во многих, хотя и не во всех, случаях выходной сигнал лазера поляризован. Поляризованное лазерное излучение является важным аспектом для широкого спектра применений.

В-четвертых, лазерное излучение имеет высокую степень когерентности: на семь порядков выше, чем у обычных источников. Это важно для многих задач интерферометрии.

В-пятых, лазеры позволяют создавать излучения, интенсивности которых достигают огромных значений. Они соответствуют эффективной температуре, превышающей температуру Солнца в  $10^{11}$ – $10^{12}$  раз!

В настоящее время разработано большое количество разнообразных лазеров и трудно назвать области, в которых бы они не использовались. В силу уникальных свойств излучения лазеров они широко применяются во многих отраслях науки и техники, а также в быту (проигрыватели компакт-дисков, лазерные принтеры, считыватели штрих-кодов, лазерные указки и пр.). Легко достижимая высокая плотность энергии излучения позволяет производить локальную термическую обработку и связанную с ней механическую обработку (резку, сварку, пайку, гравировку). Точный контроль зоны нагрева позволяет сваривать материалы, которые невозможно сварить обычными способами (к примеру, керамику и металл). Луч лазера может быть сфокусирован в точку диаметром порядка микрона, что позволяет использовать его в микроэлектронике для прецизионной механической обработки материалов (резка полупроводниковых кристаллов, сверление особо тонких отверстий в печатных платах). В медицине лазеры применяются как бескровные скальпели, используются при лечении офтальмологических заболеваний (катаракта, отслоение сетчатки, лазерная коррекция зрения и др.). И еще много других применений. Заметим, что любой, даже маломощный лазер, представляет опасность для зрения человека. Лазер часто применяется в быту, на концертах, музыкальных мероприятиях. Зафиксировано множество случаев получения ожогов сетчатки глаза, что приводило к временной или полной слепоте.

## Глава 4 ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

*Электронные свойства* твердых тел – это свойства, которые определяются энергетическим спектром электронов или существенно зависят от него. Главной задачей при изучении электронных свойств твердых тел является определение энергетического спектра электронов и характеристик электронных состояний.

### § 4.1. Энергетические зоны в твердых телах

Твердое состояние возникает при столь сильном взаимодействии между молекулами (атомами или ионами), что тепловое движение молекул не играет роли, т. е. когда энергия связи молекул значительно больше кинетической энергии их теплового движения. Равновесное устойчивое положение молекул друг относительно друга достигается при минимуме энергии взаимодействия. Точки равновесного положения составляющих кристалл атомов, молекул или ионов называются *узлами кристаллической решетки*. Наличие кристаллической решетки – наиболее важный признак твердого тела.

Проследим за образованием кристаллической решетки при сближении атомов. Возьмем очень большое число тождественных атомов, удаленных друг от друга настолько далеко, что взаимодействие между ними очень мало и практически ни в чем не проявляется. В таком случае каждый из атомов ведет себя как изолированный. В соответствии с квантовой механикой электроны, принадлежащие изолированным атомам, имеют определенные дискретные значения энергии. Начнем теперь непрерывно сближать атомы. Появится взаимодействие между атомами. При этом орбиты электронов деформируются, и, соответственно, смещаются энергетические уровни электронов на них. Это смещение можно представить себе двояко. С одной стороны, в твердом теле

электрон подвергается электрическому воздействию со стороны соседних атомов – он притягивается к их ядрам и отталкивается их электронами. С другой стороны, два электрона в силу принципа запрета Паули не могут находиться на одной орбите в одном и том же энергетическом состоянии, т. е. два любых электрона в любом случае найдутся на несколько отличающихся друг от друга энергетических уровнях. Поэтому при образовании твердого тела в смысле кристаллизации атомов в жесткую структуру каждый энергетический электронный уровень в изолированных атомах расщепляется на ряд близких подуровней, которые и образуют *энергетическую зону*.

Взаимодействие атомов при их сближении проявляется прежде всего на электронах наружных оболочек, волновые функции которых сильно перекрываются. На внутренних электронах, волновые функции которых перекрываются незначительно, это взаимодействие сказывается гораздо слабее. Поэтому глубоко расположенные атомные уровни переходят в твердом теле в очень узкие зоны, а высоко расположенные уровни порождают значительно более широкие энергетические зоны. Самыми широкими оказываются зоны, соответствующие уровням валентных электронов, находящихся на внешней оболочке атома. На рис. 4.1 схематически показано расщепление энергетических уровней изолированного атома (рис. 4.1, *а*) и образовавшиеся энергетические зоны в кристаллах (рис. 4.1, *б*).

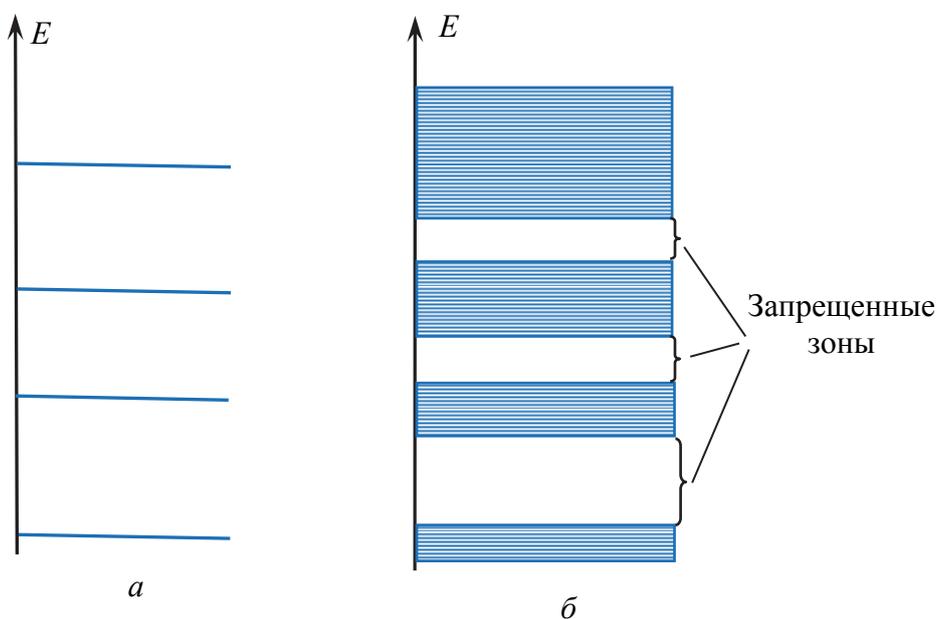


Рис. 4.1

Соседние энергетические зоны могут быть разделены промежутками конечной ширины. Энергии электронов не могут принимать значения, лежащие в этих промежутках. Они образуют «щели» в энергетическом спектре электронов и называются *запрещенными зонами*. Все остальные зоны являются разрешенными. Но могут быть и такие случаи, при которых соседние зоны вплотную примыкают или перекрываются друг с другом. Каждая из разрешенных зон состоит из громадного числа подуровней, равного числу атомов в кристалле. Соседние подуровни в разрешенных зонах отстоят друг от друга приблизительно на  $10^{-22}$  эВ, а ширина этих зон  $3\div 5$  эВ.

Зоны могут быть полностью заполненными электронами, полностью свободными и частично заполненными. В зависимости от конкретной ситуации тело обладает различными электрическими свойствами.

## § 4.2. Особенности заполнения энергетических зон электронами в металлах, диэлектриках и полупроводниках

Электрические свойства твердого тела определяются взаимным расположением различных энергетических зон и распределением электронов по этим зонам. По принципу Паули на каждом энергетическом уровне может находиться не более двух электронов с противоположно направленными спинами. Степень заполнения электронами энергетических уровней в зоне определяется заполнением соответствующих атомных уровней. Если при этом какой-то энергетический уровень полностью заполнен, то образующаяся энергетическая зона также заполнена целиком. В равновесном состоянии будут полностью заполнены электронами самые низкоэнергетические зоны. Самая высоко лежащая из полностью заполненных электронами зон называется *валентной*. За валентной следует *зона проводимости*. Она может быть либо частично заполненной, либо не содержать совсем электронов. Именно характером заполнения электронами зоны проводимости, а также шириной запрещенной зоной  $\Delta E$  между валентной зоной и зоной проводимости определяется, будет ли соответствующее кристаллическое тело проводником, диэлектриком или полупроводником.

В проводниках (металлах) зона проводимости заполнена электронами частично (рис. 4.2). В ней имеются вакантные (свободные) уровни. В данном случае электрон, получив сколь угодно малую энергетическую «добавку» (например, за счет теплового движения или электрического поля), сможет перейти на более высокий энергетический уровень той же зоны. Таким образом, в металлах электроны внешних оболочек атомов обобществляются и образуют электронный газ. Электроны мигрируют из окрестности одних атомов в окрестности других, не будучи связаны устойчиво ни с одним из атомов. Эти электроны называют *электронами проводимости*. Они обуславливают электропроводность металлов. Под влиянием внешнего электрического поля электроны проводимости приобретают преимущественное направление движения, совпадающее с направлением действия электрической силы, образуя электрический ток.

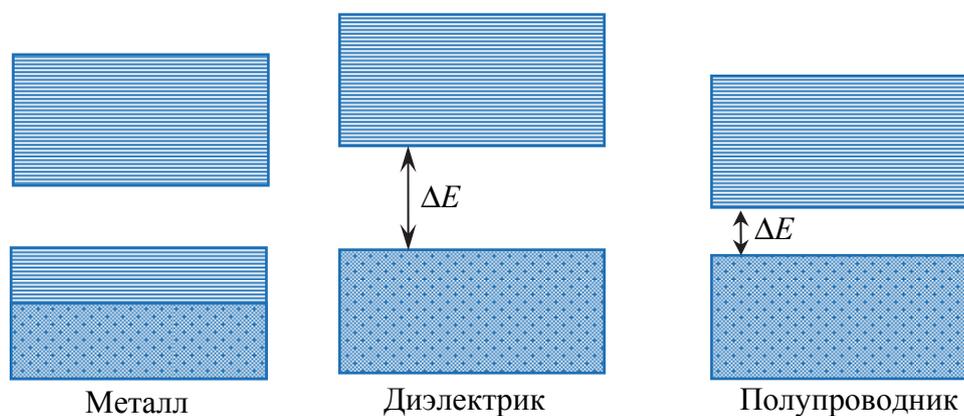


Рис. 4.2

В диэлектриках над полностью заполненной валентной зоной находится зона проводимости, совсем не содержащая электронов (рис. 4.2). Валентная зона отделена от зоны проводимости запрещенной зоной значительной ширины  $\Delta E$ . Внешнее электрическое поле действует на электроны валентной зоны и других зон, лежащих ниже валентной. Все энергетические уровни этих зон заполнены электронами. Принцип Паули запрещает электрону перейти в уже занятое другим электроном квантовое состояние. Следовательно, несмотря на наличие электрического поля, переходы электронов в валентной зоне отсутствуют. Электроны прочно связаны с атомами, и электрического тока через диэлектрик нет. Единственная остающаяся возможность для переходов – это переходы электронов с уровней валентной зоны

на уровне зоны проводимости. Такой переход при не очень сильных электрических полях невозможен. При более сильных полях возникает электрический пробой диэлектриков.

В полупроводниках, как и в диэлектриках, над полностью заполненной валентной зоной находится свободная от электронов зона проводимости. Однако в полупроводниках ширина запрещенной зоны  $\Delta E$  значительно меньше чем у диэлектриков (рис. 4.2). У диэлектриков ширина запрещенной зоны составляет несколько электрон-вольт, а у полупроводников – около 1 эВ. Из-за малости энергетического интервала между зонами  $\Delta E$  часть электронов под влиянием теплового движения или других возмущающих факторов может перейти в зону проводимости. В этом случае кристалл приобретает способность проводить электрический ток. Электропроводность полупроводников имеет промежуточные значения между проводниками и диэлектриками.

### § 4.3. Собственная проводимость полупроводников

*Собственные полупроводники* – химически чистые полупроводники, а их проводимость является *собственной проводимостью*. Наиболее важные собственные полупроводники – кремний и германий.

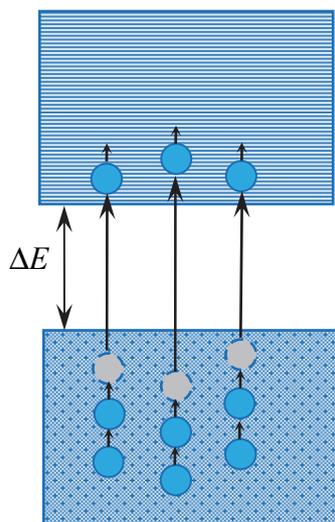


Рис. 4.3

Ширина запрещенной зоны  $\Delta E$  между валентной зоной и зоной проводимости у них невелика: у кремния – 1,1 эВ, у германия – 0,75 эВ. Благодаря этому уже при сравнительно невысоких температурах значительное число электронов из валентной зоны переходит в зону проводимости (рис. 4.3). При наложении на кристалл электрического поля электроны перемещаются против поля и создают электрический ток. Электропроводность собственных полупроводников, обусловленная электронами, называется *электронной проводимостью* или *проводимостью n-типа* (от лат. *negative* – отрицательный).

При переходе электронов из валентной зоны в зону проводимости в валентной зоне

возникают вакантные состояния, которые называют *дырками* (рис. 4.3). Во внешнем электрическом поле на освободившееся после перехода электрона место – дырку – может переместиться электрон с соседнего уровня, а дырка появится в том месте, с которого электрон ушел, и т. д. Такой процесс заполнения дырок электронами равносителен перемещению дырки в направлении, противоположном движению электрона, так как если бы дырка обладала положительным зарядом, по величине равным заряду электрона. Движение дырок в валентной зоне, подобно движению электронов в зоне проводимости, дает вклад в общую электропроводность полупроводников. Электропроводность собственных полупроводников, обусловленная движением дырок в валентной зоне, называется *дырочной проводимостью* или *проводимостью p-типа* (от лат. *positive* – положительный).

Таким образом, в собственных полупроводниках наблюдаются два механизма электропроводности: электронный и дырочный. Причем число электронов в зоне проводимости равно числу дырок в валентной зоне, так как последние образуются вследствие перехода электронов. Говоря о перемещении дырок, имеют в виду не реальную частицу, а тот факт, что ее движение отражает характер движения всей совокупности электронов валентной зоны. Это удобное понятие, и им широко пользуются.

Электропроводность собственного полупроводника тем больше, чем больше электронов переведено под влиянием теплового движения в зону проводимости. Но это число растет с увеличением температуры. Следовательно, электропроводность собственных полупроводников также возрастает с температурой. Такая зависимость от температуры является характерной особенностью собственных полупроводников. У металлов с повышением температуры проводимость уменьшается. Кроме того, электропроводность собственного полупроводника уменьшается с увеличением ширины запрещенной зоны  $\Delta E$ . Зависимость электропроводности собственных полупроводников от температуры и ширины запрещенной зоны определяется соотношением

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}, \quad (4.1)$$

где  $\sigma_0$  – постоянная, характерная для данного полупроводника;  $k$  – постоянная Больцмана.

Заметим, что электроны в зоне проводимости могут появляться не только благодаря термическому возбуждению кристалла, но и

в результате других внешних воздействий. Например, при освещении кристалла в результате поглощения электронами фотонов могут происходить их переходы из валентной зоны в зону проводимости. Это явление называют *внутренним фотоэффектом*. Для того чтобы внутренний фотоэффект наблюдался, энергия фотона должна быть не меньше ширины запрещенной зоны полупроводника, т. е.  $h\nu \geq \Delta E$ . Минимальную частоту излучения  $\nu_k$ , которая удовлетворяет этому условию, называют *красной границей внутреннего фотоэффекта*. Она определяется соотношением

$$\nu_k = \frac{\Delta E}{h}. \quad (4.2)$$

В результате при освещении концентрация электронов в зоне проводимости становится выше равновесной, которая наблюдается в отсутствии освещения. Как следствие, электропроводность полупроводника увеличивается. Обусловленное светом увеличение электропроводности называют *фотопроводимостью*. Наряду с процессами фотовозбуждения электронов идет обратный процесс – *рекомбинация* электронов и дырок, при которой электрон возвращается из зоны проводимости на свободное место в валентной зоне. При продолжительном освещении устанавливается стационарное значение концентрации неравновесных носителей. После прекращения освещения их концентрация постепенно уменьшается к своему равновесному значению.

## § 4.4. Примесная проводимость полупроводников

Электропроводимость полупроводников, обусловленная наличием в них примесных центров, называется *примесной проводимостью*, а сами полупроводники – *примесными полупроводниками*. Примесная проводимость обусловлена не только наличием в кристалле примесей, когда некоторые узлы решетки заняты не атомами основного вещества, а атомами другого вещества, но также различными дефектами кристаллической решетки, например отсутствием ионов и атомов в некоторых узлах решетки, наличием лишних атомов между узлами решетки, различные механические дефекты (трещины, дислокации и т. д.). Благодаря наличию в полупроводнике примесей и дефектов периодичность

кристаллической решетки нарушается, вследствие чего изменяется состояние электронов. Это приводит к существенному изменению электропроводности полупроводника. Процесс введения примесей называется *легированием*.

При введении в кристалл полупроводника примеси в запрещенной зоне между валентной зоной и зоной проводимости появляются *локальные (примесные)* уровни энергии. Число локальных уровней равно числу примесных центров (числу примесных атомов и дефектов). Общее число состояний при этом не изменяется, т. е. сумма числа зонных и локальных состояний равна числу состояний идеального кристалла, поэтому локальные состояния как бы отщепляются либо от валентной зоны, либо от зоны проводимости. В зависимости от того, от какой зоны отщепляются локальные уровни, они могут быть занятыми электронами либо свободными. Однако в обоих случаях эти локальные уровни могут обусловить возникновение электропроводности.

Пусть локальные уровни отщепились от валентной зоны вместе с находящимися на них электронами и находятся между валентной зоной и зоной проводимости (рис. 4.4, *а*). Энергетические расстояния  $\Delta E_d$  от этих уровней до зоны проводимости меньше, чем расстояние  $\Delta E$  от валентной зоны до зоны проводимости. Такие локальные уровни энергии называются *донорными*. Электронам с донорных уровней легче перейти в зону проводимости, чем электронам из валентной зоны. Если такой переход осуществляется, в зоне проводимости появляются электроны, принимающие участие в электропроводности. В этом случае примесный проводник обладает электронной проводимостью (*n*-типа).

Если локальные уровни энергии отщепились от пустой зоны проводимости, то они свободны (рис. 4.4, *б*). Такие локальные уровни энергии называются *акцепторными*. Расстояние между ними и валентной зоной  $\Delta E_a$  меньше, чем расстояние между зоной проводимости и валентной зоной  $\Delta E$ . Следовательно, возможны переходы электронов из валентной зоны на акцепторные уровни. Если это происходит, то в валентной зоне возникают дырки, которые могут быть заняты другими электронами из валентной зоны. В этом случае примесный проводник обладает дырочной проводимостью (*p*-типа).

В отличие от собственной проводимости, осуществляющейся одновременно электронами и дырками, примесная проводимость полупроводников обусловлена в основном носителями одного знака: либо электронами – в случае донорной примеси, либо дырками – в случае акцепторной. Эти носители тока являются *основными*. Примесные

полупроводники, в которых ток осуществляется преимущественно электронами зоны проводимости, называются полупроводниками *n*-типа, а если ток осуществляется преимущественно движением дырок в валентной зоне, полупроводниками *p*-типа. Кроме основных носителей, в полупроводниках имеются и неосновные: в полупроводниках *n*-типа – дырки, в полупроводниках *p*-типа – электроны.

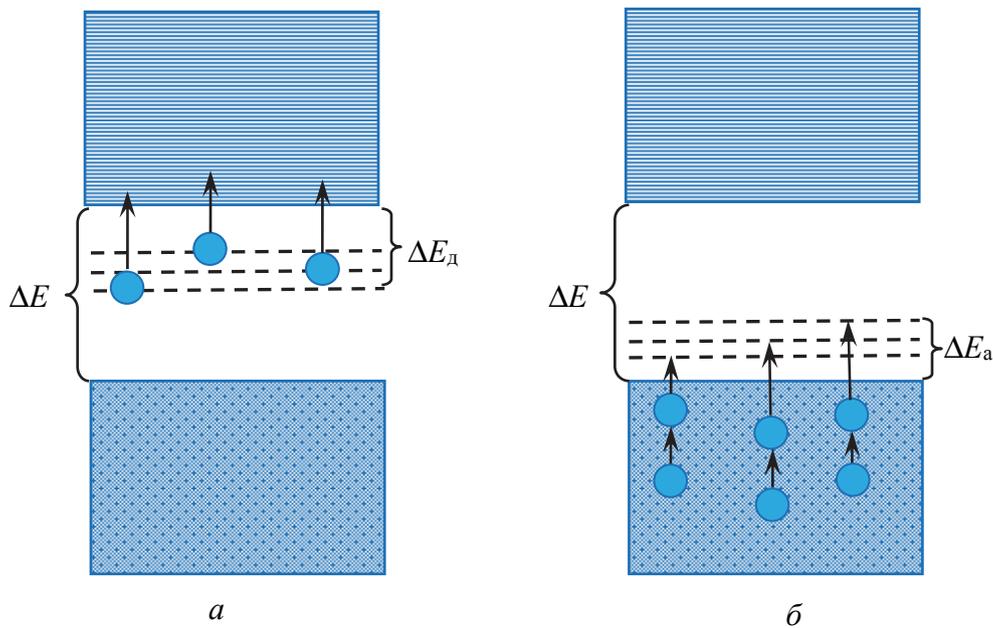


Рис. 4.4

Полупроводники обладают разнообразными и необычными свойствами, которые определяют их широкое применение. Очень сильная зависимость проводимости полупроводников от температуры делает возможным создание с их помощью достаточно чувствительных термометров и устройств, с помощью которых можно контролировать силу тока в цепи. Такие приборы называются *термисторами* (*терморезисторами*). Например, термисторы на германии очень чувствительны при низких температурах и используются вплоть до гелиевых температур. Они имеют малые размеры и применяются, в частности, в биологии. Сильная зависимость электропроводимости от давления позволяет создавать *тензодатчики*, с помощью которых измеряется давление. Явление фотопроводимости используется для создания *фоторезисторов*, с помощью которых регистрируют излучения. Широкое применение в радиотехнике находят полупроводниковые диоды и триоды, которые мы рассмотрим в следующем параграфе.

## § 4.5. *p-n*-Переход и транзисторы

Электронно-дырочным переходом или *p-n*-переходом называют область соприкосновения двух полупроводников, у одного из которых электронная (*n*-типа), а у другого дырочная (*p*-типа) проводимость. Эти переходы имеют большое практическое значение, являясь основой работы многих полупроводниковых приборов. *p-n*-Переход нельзя осуществить просто механическим соединением двух полупроводников. Он создается в собственном полупроводнике легированием донорными или акцепторными примесями по разные стороны от границы раздела. Область, легированная донорными примесями, становится *n*-областью с электронной проводимостью, а область с акцепторными примесями – *p*-областью с дырочной проводимостью.

Рассмотрим физические процессы, протекающие в *p-n*-переходе (рис. 4.5). В *n*-области концентрация электронов больше, а дырок меньше, чем в *p*-области. В *p*-области, наоборот, концентрация дырок больше, чем в *n*-области, поэтому после создания перехода электроны из *n*-области диффундируют в *p*-область, а дырки – в обратном направлении.

В результате в *n*-полупроводнике вблизи границы раздела из-за ухода электронов остается uncompensated положительный заряд, а в *p*-полупроводнике – отрицательный заряд (рис. 4.5, *a*). Возникающее в результате этого электрическое поле стремится замедлить диффузию электронов и дырок. При некоторой разности потенциалов при определенной толщине  $d$  слоя *p-n*-перехода наступает равновесное состояние – диффузия прекращается. Толщина  $d$

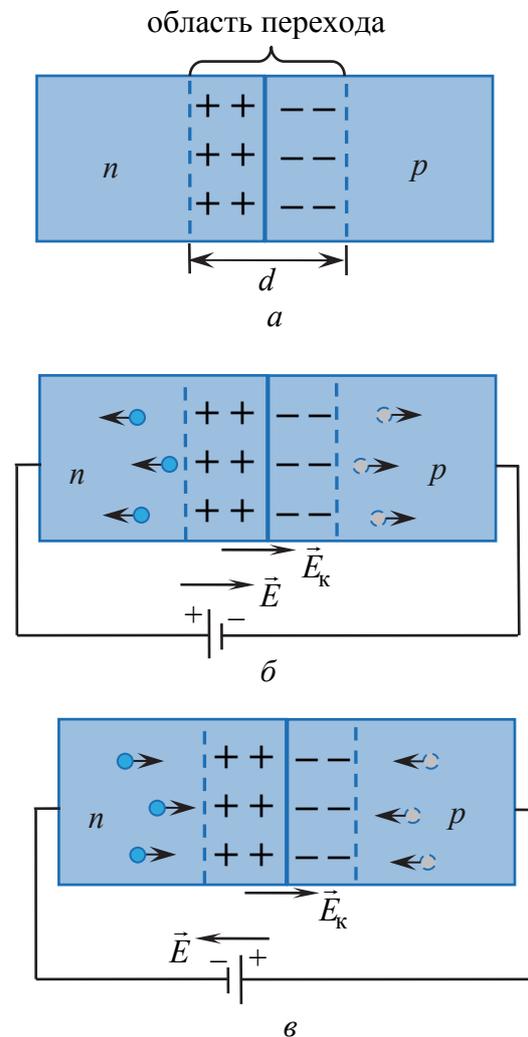


Рис. 4.5

в полупроводниках составляет примерно  $10^{-7}$ – $10^{-6}$  м, а контактная разность потенциалов – десятые доли вольт. Носители тока способны преодолеть такую разность потенциалов лишь при температуре в несколько тысяч градусов. Таким образом, при обычных температурах равновесный контактный слой является *запирающим*. Ток через переход не проходит, он характеризуется повышенным сопротивлением.

Сопротивление запирающего слоя можно изменить с помощью внешнего электрического поля. Если внешняя разность потенциалов приложена так, что со стороны *n*-области потенциал положителен, а со стороны *p*-области – отрицателен (рис. 4.5, б), то напряженность внешнего электрического поля  $\vec{E}$  направлена от *n*-полупроводника к *p*-полупроводнику, т. е. также как напряженность поля запирающего контактного слоя  $\vec{E}_к$ . В этом случае внешнее поле вызывает движение электронов в *n*-области и дырок в *p*-области от границы *p-n*-перехода в противоположные стороны. В результате запирающий слой расширится и его сопротивление возрастет. Направление внешнего поля, расширяющего запирающий слой, называется *запирающим (обратным)*. В этом направлении электрический ток через переход практически не проходит. Ток в запирающем слое в запирающем направлении образуется лишь за счет неосновных носителей тока, концентрация которых невелика, и является малым.

Если внешняя разность потенциалов приложена так, что со стороны *n*-области потенциал отрицателен, а со стороны *p*-области – положителен (рис. 4.5, в), то напряженность внешнего электрического поля  $\vec{E}$  направлена противоположно напряженности поля запирающего контактного слоя  $\vec{E}_к$ . В этом случае внешнее поле вызывает движение

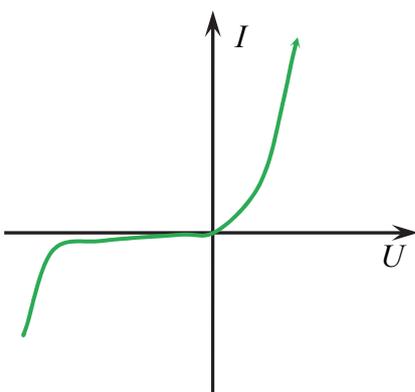


Рис. 4.6

электронов в *n*-области и дырок в *p*-области к границе *p-n*-перехода навстречу друг другу. В этой области они рекомбинируют, толщина контактного слоя и его сопротивление уменьшаются. Следовательно, в данном направлении электрический ток проходит через *p-n*-переход от *p*-области к *n*-области. Это направление называется *пропускным (прямым)*.

Таким образом, *p-n*-переход обладает *односторонней (вентильной) проводимостью*. На рис. 4.6 показана вольт-амперная ха-

рактеристика  $p$ - $n$ -перехода. Прямое направление соответствует положительному значению разности потенциалов  $U$  на  $p$ - $n$ -переходе. При увеличении  $U$  сила тока через переход быстро увеличивается. При запирающем напряжении ( $U < 0$ ) ток является очень малым и обусловлен движением неосновных носителей заряда. Быстрое возрастание тока на этом участке означает пробой контактного слоя и его разрушение.

$p$ - $n$ -Переход, обладая односторонней проводимостью, действует как вакуумная двухэлектродная лампа – диод [3]. Поэтому полупроводниковое устройство, содержащее один  $p$ - $n$ -переход, называется *полупроводниковым диодом*.

Добавляя в полупроводник еще один  $p$ - $n$ -переход или несколько таких переходов, можно получить транзисторы, четырехслойные диоды и другие полупроводниковые приборы, позволяющие с помощью слабых сигналов управлять протеканием электрического тока.

*Транзистор* – это трехэлектродный прибор, аналогичный вакуумной трехэлектродной лампе – триоде. Он представляет собой монокристалл полупроводника, в котором соответствующим легированием создан узкий слой с  $p$ -проводимостью, разделяющий области с  $n$ -проводимостями (рис. 4.7, а), или узкий слой с  $n$ -проводимостью, разделяющий области с  $p$ -проводимостями (рис. 4.7, б). Другими словами, транзистор является совокупностью двух достаточно близко расположенных  $p$ - $n$ -переходов.

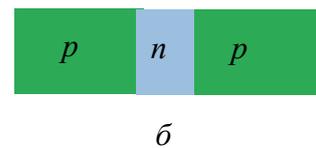
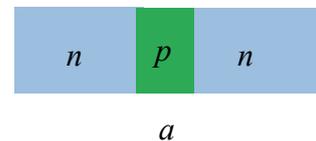


Рис. 4.7

В случае транзистора, изображенного на рис. 4.7, а, он называется *npn*-транзистором, а на рис. 4.7, б, – *pnп*-транзистором. Узкий слой в середине транзистора называется *базой*, а крайние области – *эмиттером* и *коллектором*. Коллектор обычно содержит большую концентрацию примесных атомов. Для базы существенна ее узость, чтобы большинство носителей, пересекающих один из  $p$ - $n$ -переходов, могли до своей рекомбинации успеть пересечь также и второй  $p$ - $n$ -переход. В типичных условиях это означает, что ширина базы не должна превышать 0,1–0,2 мкм.

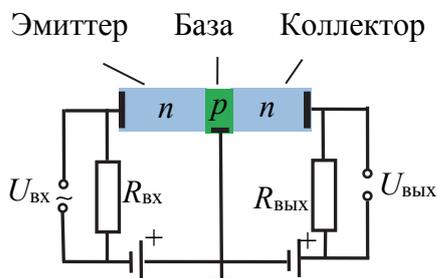


Рис. 4.8

Явления, происходящие в *npn*- и *pnп*-транзисторах, аналогичны, меняются лишь роли электронов и дырок.

Поэтому рассмотрим для определенности, например, *pnp*-транзистор. Его можно включить в цепь тремя способами в зависимости от того, какая часть транзистора соединена с общей точкой схемы. Пусть транзистор включен по схеме с общей базой (рис 4.8). Видно, что переход база – эмиттер включен в пропускном направлении, а база – коллектор – в запирающем. Следовательно, в цепи коллектора сила тока не зависит от напряжения на коллекторе, а сопротивление очень велико. В цепи эмиттера сила тока существенно зависит от напряжения на эмиттере, причем сопротивление цепи эмиттера мало. Часть электронов, вошедших с эмиттера в базу, диффундируют по направлению к коллектору. Причем при небольшой толщине базы значительная их часть достигает коллектора и изменяет силу тока в его цепи. Следовательно, всякое изменение тока в цепи эмиттера вызывает изменение тока в цепи коллектора. Причем изменение силы тока в цепи коллектора приблизительно равно изменению силы тока в цепи эмиттера. Прикладывая между эмиттером и базой переменное напряжение  $U_{вх}$  на входное сопротивление  $R_{вх}$ , получим в цепи коллектора переменный ток, а на выходном сопротивлении  $R_{вых}$  – переменное напряжение  $U_{вых}$ . Обычно  $R_{вых} \gg R_{вх}$ , поэтому  $U_{вых}$  значительно превышает входное напряжение  $U_{вх}$ . Следовательно, транзистор дает усиление напряжения. Усиление по напряжению может достигать  $10^4$ . Так как мощность переменного тока, выделяемая на выходном сопротивлении  $R_{вых}$ , может быть больше, чем расходуемая в цепи эмиттера, то транзистор дает и усиление мощности. Эта усиленная мощность появляется за счет источника тока, включенного в цепь коллектора.

Полупроводниковые приборы – диоды, транзисторы – выполняют те же функции, что и электронные вакуумные лампы. Но их габариты и потребляемая энергия настолько меньше, что они сделали возможным решение принципиально новых задач. Например, современный компьютер содержит столько функциональных элементов, что само его существование возможно только благодаря очень малому размеру этих элементов: на кремниевом кристалле процессора компьютера уместятся миллионы транзисторов, соединенных в сложную электрическую схему.

## Глава 5 СТРОЕНИЕ АТОМНОГО ЯДРА

### § 5.1. Состав атомного ядра и его характеристики

Ядро атома любого элемента состоит из протонов и нейтронов. *Протон* представляет собой ядро простейшего атома – атома водорода. Он имеет спин  $s = 1/2$ , т. е. является фермионом, и положительный электрический заряд  $q_p$ , равный по величине заряду электрона:

$$q_p = + e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл.} \quad (5.1)$$

Масса протона

$$m_p = 1,673 \cdot 10^{-27} \text{ кг.} \quad (5.2)$$

*Нейтрон* также является фермионом, его спин  $s = 1/2$ . Он не имеет электрического заряда  $q_n = 0$ , т. е. является электрически нейтральным. Масса нейтрона

$$m_n = 1,675 \cdot 10^{-27} \text{ кг.} \quad (5.3)$$

Протон считается абсолютно стабильной частицей. В настоящее время распад свободного протона (не входящего в состав атомного ядра) на другие частицы не обнаружен. Время его жизни  $\tau > 10^{33}$  лет (сравните со временем существования видимой части Вселенной порядка  $10^{10}$  лет). Свободный нейтрон нестабилен. В свободном состоянии он самопроизвольно превращается в протон, испуская электрон и еще одну частицу, которую называют электронным антинейтрино. Среднее время жизни нейтрона близко к  $\tau = 15$  мин.

Силы, действующие между протонами и нейтронами в ядре и удерживающие их вместе, называются *ядерными*. Эти силы представляют собой проявление самого интенсивного из известных в физике взаимодействий – так называемого *сильного взаимодействия*. Ядерные силы проявляются только на коротких расстояниях. Радиус их действия составляет примерно  $10^{-13}$  см. Они приблизительно в 100–1000 раз больше кулоновской силы взаимодействия между электрическими зарядами и в  $10^{38}$  раз больше сил их гравитационного взаимодействия.

Если отвлечься от различия между протоном и нейтроном, связанного с наличием у протона электрического заряда, то они весьма похожи друг на друга: у них приблизительно одинаковые массы и совпадает спин, кроме того, ядерные силы между двумя протонами, двумя нейтронами или протоном и нейтроном неразличимы. Поэтому, согласно современным представлениям, протон и нейтрон являются двумя различными состояниями одной и той же частицы, которую называют *нуклоном*. Число нуклонов в ядре (протонов и нейтронов) обозначают  $A$  и называют *массовым числом*:

$$A = Z + N, \quad (5.4)$$

где  $Z$  – *зарядовое число* ядра, равное числу протонов в ядре и совпадающее с порядковым номером химического элемента в Периодической системе элементов Менделеева;  $N$  – число нейтронов в ядре.

Заряд атомного ядра

$$q_{\text{я}} = +Ze. \quad (5.5)$$

Для обозначения ядер принята символика

$${}^A_Z\text{X}, \quad (5.6)$$

где  $X$  – символ химического элемента.

Например, ядро атома водорода  ${}^1_1\text{H}$  состоит из одного протона, ядро атома лития  ${}^7_3\text{Li}$  содержит три протона и четыре нейтрона. Ядра с одинаковым числом  $Z$ , но разными массовыми числами  $A$  называются *изотопами*. Они содержат различное число нейтронов. Химические элементы имеют по несколько изотопов и в природе встречаются в виде смесей определенного процентного состава. Например, на данный момент известно 26 изотопов урана. В природе встречаются три изотопа урана:  ${}^{234}_{92}\text{U}$  (процентное содержание в урановой руде 0,0055%),  ${}^{235}_{92}\text{U}$  (0,72%),  ${}^{238}_{92}\text{U}$  (99,27%). Атом водорода в природе встречается в виде трех изотопов, которые имеют индивидуальные названия и химические символы:  ${}^1_1\text{H}$  – *протий* (H),  ${}^2_1\text{H}$  – *дейтерий* (D),  ${}^3_1\text{H}$  – *тритий* (T). Протий составляет 99,98% от общего числа атомов водорода во Вселенной и является наиболее распространенным ядром в природе среди всех химических элементов. Обычно, когда говорят о водороде, имеют в виду легкий водород – протий.

Размеры ядер зависят от числа содержащихся в них нуклонов. В первом приближении ядро можно считать сферическим. Все методы определения радиуса ядра приводят к формуле

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad (5.7)$$

где  $r_0 \approx 1,4 \cdot 10^{-13}$  см.

Из (5.7) следует, что объем ядра пропорционален массовому числу  $V \sim A$ . Поэтому плотность ядерного вещества практически одинакова для всех ядер и составляет около  $10^{14}$  г/см<sup>3</sup>. Это чрезвычайно большая плотность по сравнению с плотностью обычных веществ. Она характерна для некоторых космических объектов, например нейтронных звезд – пульсаров.

## § 5.2. Дефект массы и энергия связи ядра

Масса ядра  $m_{\text{я}}$  всегда меньше суммы масс, входящих в него частиц. Это обусловлено действием ядерных сил притяжения между нуклонами. Энергия сильного взаимодействия между нуклонами составляет заметную часть энергии покоя ядра. *Дефектом массы  $\Delta m$*  ядра называют разность между суммой масс протонов и нейтронов в ядре и массой ядра:

$$\Delta m = Zm_p + Nm_n - m_{\text{я}}. \quad (5.8)$$

Так как всякому изменению массы соответствует изменение энергии, то при образовании ядра должна выделяться определенная энергия. Наоборот, для разделения ядра на составные части необходимо затратить такое же количество энергии, которое выделяется при его образовании. Энергию, которую необходимо затратить, чтобы расщепить ядро на отдельные нуклоны, называют *энергией связи ядра*. Она определяется по формуле

$$E_{\text{св}} = \Delta mc^2 = (Zm_p + Nm_n - m_{\text{я}})c^2. \quad (5.9)$$

Опыт показывает, что энергия связи ядра тем больше, чем больше в нем нуклонов. Поэтому важной характеристикой является *удельная энергия связи*, отношение энергии связи ядра к его массовому числу, т. е. средняя энергия связи, приходящаяся на один нуклон:

$$\varepsilon_{\text{св}} = \frac{E_{\text{св}}}{A} = \frac{\Delta m}{A} c^2. \quad (5.10)$$

Удельная энергия связи характеризует устойчивость (прочность) атомных ядер. Чем больше  $\varepsilon_{\text{св}}$ , тем устойчивее ядро. Например, для

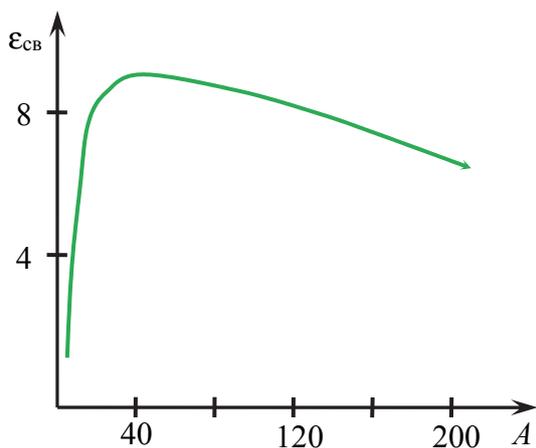


Рис. 5.1

нуклоны в ядрах с массовыми числами  $A \approx 50-60$ , т. е. для элементов от Sr до Zn. Энергия связи для этих ядер достигает  $8,7 \text{ МэВ/нуклон}$ . С увеличением массового числа удельная энергия связи постепенно уменьшается, для самого тяжелого природного элемента – урана она составляет  $7,5 \text{ МэВ/нуклон}$ . Такая зависимость удельной энергии связи от массового числа делает энергетически возможными два процесса, приводящие к выделению большого (по сравнению с химическими процессами) количества энергии: 1) деление тяжелых ядер на более легкие ядра и 2) слияние (синтез) легких ядер в одно более тяжелое ядро. Заметим, что удельная энергия связи порядка  $8 \text{ МэВ}$  не превышает 1% энергии, соответствующей энергии покоя нуклона ( $E_0 = 938 \text{ МэВ}$ ).

Энергия связи нуклонов в ядре уменьшается из-за кулоновского отталкивания между протонами. Это кулоновское отталкивание является дальнодействующим, в отличие от ядерного взаимодействия, действующего между соприкасающимися нуклонами. Для легких ядер эффект кулоновского отталкивания не играет существенной роли, но для тяжелых ядер ситуация уже иная. С ростом  $Z$  роль кулоновской энергии увеличивается. Этим объясняется уменьшение удельной энергии связи тяжелых ядер.

### § 5.3. Ядерные реакции

*Ядерными реакциями* называются превращения атомных ядер, вызванные их взаимодействием с другими ядрами или элементарными частицами. Ядерные реакции могут происходить в естественных условиях

ядра гелия  ${}^4_2\text{He}$  энергия связи составляет  $E_{\text{св}} = 28,4 \text{ МэВ}$ , а удельная энергия связи  $\epsilon_{\text{св}} = 7,1 \text{ МэВ}$ . Для сравнения укажем, что энергия связи валентных электронов в атоме имеет величину в  $10^6$  раз меньшую (порядка  $10 \text{ эВ}$ ). На рис. 5.1 показана зависимость удельной энергии связи от массового числа. Для большинства ядер их удельная энергия связи имеет приблизительно такую же величину, как у гелия. Сильнее всего связаны

(например, в недрах звезд или космических лучах), но их изучение обычно производится в лабораторных условиях на экспериментальных установках, в которых заряженные частицы ускоряются с помощью ускорителей. Ускорением достигается сближение частиц на расстояния порядка  $10^{-13}$  см, на которых начинают действовать ядерные силы.

Ядерные реакции принято символически записывать в виде



где  $A$  и  $B$  – исходное и конечное ядра;  $a$  и  $b$  – бомбардирующая исходное ядро и испускаемая в реакции частицы.

Эффективность взаимодействия в ядерной реакции частиц характеризуют *эффективным сечением*  $\sigma$ . По определению

$$\sigma = \frac{n}{n_0 j}, \quad (5.12)$$

где  $n$  – число ядерных превращений за единицу времени;  $n_0$  – число ядер мишени и  $j$  – плотность потока частиц, падающих на мишень, т. е. число частиц, падающих в единицу времени на единицу площади мишени.

Эффективное сечение имеет размерность площади и характеризует вероятность, что ядерная реакция произойдет. Единица измерения эффективного сечения – *барн* (1 барн =  $10^{-28}$  м<sup>2</sup>). Большинство сечений ядерных реакций имеют значения от  $10^{-3}$  барн до 10 барн, т. е. порядка геометрических сечений ядер, однако есть реакции, сечения которых много больше геометрических сечений ядра (порядка  $10^5$  барн).

Важным параметром ядерной реакции является *энергия ядерной реакции*  $Q$ , которая определяется по формуле

$$Q = \left( \sum_k m_k - \sum_k m'_k \right) c^2, \quad (5.13)$$

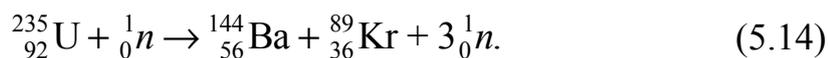
где в скобках стоит разность сумм масс покоя частиц до и после реакции.

Если  $Q < 0$ , то реакция идет с поглощением энергии и называется *эндотермической*. При  $Q > 0$  реакция идет с выделением энергии и называется *экзотермической*. Заметим, что эндотермические ядерные реакции возможны только в случае, когда частица, вызывающая реакцию, имеет кинетическую энергию, превышающую некоторое пороговое значение.

В любой ядерной реакции всегда выполняются законы сохранения энергии и импульса, электрического заряда, а также числа нуклонов, участвующих в реакции. Как следствие, сумма зарядовых чисел частиц, а также массовых чисел до и после реакции не изменяется.

В качестве примера ядерных реакций рассмотрим ядерные реакции деления тяжелых ядер и синтеза легких ядер, которые представляют собой два принципиально различных способа освобождения ядерной энергии для практического применения.

При облучении урана-235 нейтронами его ядро захватывает нейтрон и делится на два радиоактивных ядра-осколка с массовыми числами порядка 100. При этом в каждом элементарном акте распада ядра урана образуется несколько нейтронов. Например,



Энергия, выделяемая при данной реакции, составляет  $Q = 200$  МэВ на один акт деления ядра. Поскольку в каждом акте испускается нейтронов больше, чем поглощается, то при делении урана-235 может возникнуть самоподдерживающаяся *цепная реакция*, т. е. процесс, в котором определенная ядерная реакция вызывает последующую реакцию такого же типа. Устройство, в котором осуществляется управляемая ядерная реакция, сопровождающаяся выделением энергии, называется *ядерным реактором*. Один килограмм урана в ядерном топливе при полном выгорании в реакторе выделяет энергию, эквивалентную сжиганию примерно 100 тонн высококачественного каменного угля (1,5 железнодорожных вагона) или 60 тонн нефти (примерно 1 железнодорожная цистерна).

Большинство образующихся в реакциях деления ядер-осколков радиоактивны и оказывают вредное воздействие на окружающую среду и человека. Ядерная энергетика остается предметом острых дебатов. Сторонники и противники ядерной энергетике резко расходятся в оценках ее безопасности, надежности и экономической эффективности. Опасность связана с проблемами утилизации отходов, авариями, приводящими к экологическим и техногенным катастрофам, а также с возможностью использовать повреждение этих объектов в результате теракта как оружие массового поражения.

Второй путь освобождения ядерной энергии связан с реакциями синтеза. В обычных условиях слиянию легких ядер в одно энергетически более выгодное тяжелое ядро препятствуют кулоновские силы отталкивания между положительно заряженными ядрами. Для преодоления этих сил ядрам необходимо сообщить дополнительную кинетическую энергию, соответствующую температурам порядка  $10^8$  К. Такие условия реализуются на Солнце и других звездах, на которых активно происходит синтез ядер. Реакции такого типа называются

*термоядерными*. Примером такой реакции является слияние дейтерия и трития, в результате чего образуется ядро гелия и испускается протон:



В данной реакции выделяется энергия  $Q = 17,3$  МэВ. Хотя это значительно меньше, чем при реакции деления (5.14), тем не менее для промышленного использования реакции синтеза представляются более перспективными. Это связано прежде всего с тем, что выход энергии на грамм прореагировавшего вещества в реакциях деления и синтеза приблизительно одинаков (из-за того, что в грамме рабочей смеси больше легких ядер, чем тяжелых, т. е. возможно большее число актов слияния, чем деления). Однако стоимость получения грамма рабочей смеси из легких элементов примерно в сто раз меньше затрат на получение грамма делящихся изотопов. Кроме того, запасы такого элемента, как дейтерий, на Земле практически неисчерпаемы. Он содержится в обычной воде, и технология его получения из воды хорошо отработана. Тритий практически отсутствует на Земле, но его также без проблем можно получить в ядерных реакциях, например, при взаимодействии нейтрона с литием. Не последнюю роль играет экологическая чистота работы термоядерного реактора – продукты реакций синтеза не радиоактивны, в отличие от продуктов реакций деления, требующих строительства специальных сооружений для их захоронения. Радиационная биологическая опасность термоядерных реакторов примерно в тысячу раз ниже, чем реакторов деления. Создание электростанций, использующих энергию термоядерных реакций, прогнозируется на первую половину XXI века.

## § 5.4. Радиоактивность

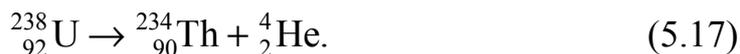
*Радиоактивностью* называется явление самопроизвольного превращения путем распада одних атомных ядер в другие, сопровождающееся испусканием одной или нескольких частиц. Ядра, подверженные такому распаду, называют *радиоактивными*, а не испытывающие распада, – *стабильными*. Более 90% известных атомных ядер являются радиоактивными. Большая их часть получена искусственным путем в ядерных реакциях. Существует два основных вида радиоактивного распада: 1) альфа-распад ( $\alpha$ -распад) и 2) бета-распад ( $\beta$ -распад).

При  $\alpha$ -распаде ядро самопроизвольно распадается с испусканием  $\alpha$ -частицы – ядра гелия. Схема распада имеет вид



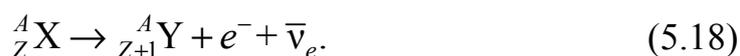
где  $X$  – материнское ядро, которое распадается;  $Y$  – дочернее ядро, которое образуется.

Примером  $\alpha$ -распада служит распад урана-238, протекающий с образованием тория:



Кинетическая энергия вылетающей  $\alpha$ -частицы равна нескольким МэВ, ее скорость порядка  $10^7$  м/с. Пролетая через вещество,  $\alpha$ -частица постепенно теряет свою энергию, затрачивая ее на ионизацию молекул вещества, и, в конце концов, останавливается. Естественно, что чем больше плотность вещества, тем меньше пробег  $\alpha$ -частицы до остановки. Так, в воздухе при нормальном давлении пробег составляет несколько сантиметров, в твердом веществе пробег равен всего нескольким десяткам микрон ( $\alpha$ -частицы полностью задерживаются обычным листом бумаги).

При  $\beta$ -распаде ядро самопроизвольно испускает электрон  $e^-$  и электронное антинейтрино  $\bar{\nu}_e$  ( $\beta^-$ -распад), или позитрон  $e^+$  и электронное нейтрино  $\nu_e$  ( $\beta^+$ -распад), либо поглощает один из электронов атомной оболочки, испуская электронное нейтрино (электронный захват). При  $\beta$ -распаде ядро превращается в ядро с тем же массовым числом  $A$ , а зарядовое число увеличивается или уменьшается на единицу. Например, схема  $\beta^-$ -распада имеет вид



Простейшим примером  $\beta^-$ -распада является распад трития:



Электроны значительно меньше  $\alpha$ -частиц, поэтому их проникающая способность на порядок больше, чем  $\alpha$ -частиц. Благодаря таким свойствам для защиты от  $\beta$ -излучения достаточно иметь соответствующей толщины экран из органического стекла или тонкий слой алюминия.

Альфа- и бета-распады могут сопровождаться гамма-излучением ( $\gamma$ -излучением). Причина возникновения этого излучения состоит

в том, что дочернее ядро, образующееся при распаде, может возникать не только в основном, но и в возбужденном состоянии. Переходя из возбужденного состояния в основное, ядро высвечивает  $\gamma$ -фотон. Гамма-излучение обладает большой проникающей способностью, т. е. может проходить сквозь большие толщи вещества.

Распад радиоактивных ядер носит принципиально вероятностный характер. Нельзя сказать, что какие-то конкретные ядра в радиоактивном образце распадутся за рассматриваемое время, но можно практически с полной достоверностью предсказать, сколько атомов распадется за это время. И это вероятностное предсказание будет выполняться тем точнее, чем с большим количеством радиоактивных ядер имеют дело.

Вероятность распада ядра за единицу времени называется *постоянной радиоактивного распада*  $\lambda$ . Она определяется соотношением

$$\lambda = \frac{dN_{\text{расп}}}{Ndt}, \quad (5.20)$$

где  $dN_{\text{расп}}$  – число распавшихся из  $N$  радиоактивных ядер за время  $dt$ .

Принимая во внимание, что изменение числа радиоактивных ядер из-за распада  $dN = -dN_{\text{расп}}$ , из (5.20) найдем

$$dN = -\lambda Ndt, \quad (5.21)$$

где знак минус указывает на то, что число радиоактивных ядер уменьшается при их распаде.

Разделяя переменные в (5.21) и учитывая, что  $\lambda$  не зависит от времени, после интегрирования получим *основной закон радиоактивного распада*:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (5.22)$$

где  $N$  – число радиоактивных ядер в момент времени  $t$ ;  $N_0$  – число радиоактивных ядер в начальный момент времени.

*Активностью*  $a$  изотопа в радиоактивном источнике называют число распадов, происходящих в единицу времени. Используя (5.22), найдем

$$a = \left| \frac{dN}{dt} \right| = \lambda N. \quad (5.23)$$

В СИ активность измеряют в беккерелях (Бк): 1 Бк – это активность, при которой в 1 с происходит один распад. Используют также внесистемную единицу активности *кюри* (Ки): 1 Ки =  $3,7 \cdot 10^{10}$  Бк.

Найдем среднее время жизни ядра. Для этого надо просуммировать время жизни всех ядер и разделить на первоначальное число радиоактивных ядер. Так как за промежуток времени от  $t$  до  $t + dt$  распадется  $dN_{\text{расп}} = -dN$  ядер, то можно сказать, что каждое из этих ядер «живет» время  $t$ , считая от начала отсчета времени. Суммарное время жизни этих ядер –  $tdN$ , а суммарное время жизни всех  $N_0$  ядер определяется интегралом

$$-\int_{N_0}^0 tdN = \lambda N_0 \int_0^{\infty} te^{-\lambda t} dt = \frac{N_0}{\lambda}.$$

Таким образом, среднее время жизни  $\tau$  радиоактивного ядра

$$\tau = \frac{1}{\lambda}. \quad (5.24)$$

Среднее время жизни (5.24) равно промежутку времени, за который число ядер уменьшится в  $e$  раз.

Время  $T_{1/2}$ , по истечении которого число радиоактивных ядер уменьшается в два раза, называется *периодом* или *временем полураспада*. Из (5.22) следует, что

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \tau \ln 2. \quad (5.25)$$

Постоянство константы радиоактивного распада позволяет измерять возраст различных природных и искусственных объектов по распаду входящих в их состав радиоактивных ядер и накоплению продуктов распада. Разработан ряд методов радиоизотопного датирования, позволяющих измерять возраст объектов в диапазоне от единиц до миллиардов лет. Среди них наиболее известны радиоуглеродный метод, уран-свинцовый, уран-гелиевый, калий-аргоновый и др.

Например, закон радиоактивного распада позволяет оценить возраст Земли на основе известного процентного содержания в урановой руде урана-238 и урана-235. Измеренные времена жизни этих изотопов составляют соответственно  $\tau_1 = 6,52 \cdot 10^9$  лет и  $\tau_2 = 1,02 \cdot 10^9$  лет. Их процентное содержание в естественной смеси составляет  $\eta_1 \approx 99,3\%$  и  $\eta_2 \approx 0,7\%$ . Естественно предположить, что в момент образования химических элементов, в том числе урана, содержание этих изотопов было одинаковым. Тогда, используя (5.22) и (5.24), число радиоактивных ядер через время  $t$

$$N_{238} = N_0 e^{-\frac{t}{\tau_1}}, \quad N_{235} = N_0 e^{-\frac{t}{\tau_2}}. \quad (5.26)$$

Процентное содержание урана-235 в смеси

$$\eta_2 = \frac{N_{235}}{N_{238} + N_{235}} \approx \frac{N_{235}}{N_{238}} = e^{-t \left( \frac{1}{\tau_2} - \frac{1}{\tau_1} \right)}.$$

Отсюда возраст Земли, лет,

$$t = -\frac{\tau_2 \tau_1}{\tau_1 - \tau_2} \ln \eta_2 \approx 6 \cdot 10^9. \quad (5.27)$$

Это значение хорошо согласуется с другими оценками возраста Земли, полученными на основе геологических и космологических соображений.

1. Кленицкий, Д. В. Физика [Электронный ресурс]: тексты лекций для студентов инженерно-технических специальностей. В 5 ч. Ч. 1. Механика / Д. В. Кленицкий. – Минск: БГТУ, 2010. – 128 с.
2. Кленицкий, Д. В. Физика [Электронный ресурс]: тексты лекций для студентов инженерно-технических специальностей. В 5 ч. Ч. 2. Термодинамика. Молекулярная физика / Д. В. Кленицкий. – Минск: БГТУ, 2012. – 86 с.
3. Кленицкий, Д. В. Физика [Электронный ресурс]: тексты лекций для студентов инженерно-технических специальностей. В 5 ч. Ч. 3. Электричество / Д. В. Кленицкий. – Минск: БГТУ, 2015. – 109 с.
4. Кленицкий, Д. В. Физика [Электронный ресурс]: тексты лекций для студентов инженерно-технических специальностей. В 5 ч. Ч. 4. Магнетизм / Д. В. Кленицкий. – Минск: БГТУ, 2017. – 97 с.
5. Кленицкий, Д. В. Физика [Электронный ресурс]: тексты лекций: Геометрическая, волновая и квантовая оптика / Д. В. Кленицкий. – Минск: БГТУ, 2009. – 86 с.
6. Курс физики: в 3 т. Т. 2. Волновые процессы. Оптика. Атомная и ядерная физика / А. А. Детлаф [и др.]. – М.: Высш. шк., 1979. – 511 с.
7. Савельев, И. В. Курс общей физики. В 3 т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И. В. Савельев. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
8. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. В 5 т. Т. 5, ч. 1. Атомная физика / Д. В. Сивухин. – М.: Физматлит, 1986. – 426 с.
9. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. В 5 т. Т. 5, ч. 2. Ядерная физика / Д. В. Сивухин. – М.: Физматлит, 1989. – 415 с.

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Глава 1. СТРОЕНИЕ И СПЕКТРЫ АТОМА.....	3
§ 1.1. Ядерная модель атома и опыты Резерфорда.....	3
§ 1.2. Постулаты Бора.....	6
§ 1.3. Энергии стационарных состояний водородоподобных систем.....	7
§ 1.4. Спектр атома водорода.....	9
§ 1.5. Недостатки теории Бора.....	11
Глава 2. ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.....	13
§ 2.1. Волновые свойства частиц. Гипотеза де-Бройля.....	13
§ 2.2. Соотношения неопределенностей Гейзенберга.....	14
§ 2.3. Волновая функция и ее статистический смысл.....	15
§ 2.4. Уравнение Шредингера.....	17
§ 2.5. Движение свободной частицы.....	18
§ 2.6. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме.....	19
§ 2.7. Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект.....	21
Глава 3. СОВРЕМЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О СТРОЕНИИ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ.....	24
§ 3.1. Водородоподобная система в квантовой механике.....	24
§ 3.2. Многоэлектронные атомы. Принцип Паули.....	26
§ 3.3. Химические связи атомов в молекулах.....	30
§ 3.4. Спонтанное и вынужденное излучения. Оптические квантовые генераторы (лазеры).....	31
Глава 4. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ.....	36
§ 4.1. Энергетические зоны в твердых телах.....	36
§ 4.2. Особенности заполнения энергетических зон электронами в металлах, диэлектриках и полупроводниках.....	38

§ 4.3. Собственная проводимость полупроводников .....	40
§ 4.4. Примесная проводимость полупроводников .....	42
§ 4.5. <i>p-n</i> -Переход и транзисторы.....	45
Глава 5. СТРОЕНИЕ АТОМНОГО ЯДРА.....	49
§ 5.1. Состав атомного ядра и его характеристики .....	49
§ 5.2. Дефект массы и энергия связи ядра.....	51
§ 5.3. Ядерные реакции.....	52
§ 5.4. Радиоактивность .....	55
ЛИТЕРАТУРА .....	60

Учебное издание

**Кленицкий** Дмитрий Викентьевич

**ФИЗИКА**

**Строение и свойства вещества**

Тексты лекций

Редактор *Е. И. Гоман*

Компьютерная верстка *Е. В. Ильченко*

Корректор *Е. И. Гоман*

Издатель:

УО «Белорусский государственный технологический университет».

Свидетельство о государственной регистрации издателя,  
изготовителя, распространителя печатных изданий

№ 1/227 от 20.03.2014.

Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.