

**ДОНБАСЬКА ДЕРЖАВНА МАШИНОБУДІВНА АКАДЕМІЯ**

**кафедра фізики**

**Конспект лекцій**

**з дисципліни «Фізика»**

**ОПТИКА. КВАНТОВА МЕХАНІКА. ФІЗИКА ТВЕРДОГО ТІЛА**

*Затверджено на засіданні кафедри фізики  
Протокол № \_\_\_\_\_ від \_\_\_\_\_*

<b>VII Оптика.....</b>	<b>5</b>
<b>25 Загальні відомості з оптики. Геометрична та фізична оптика.....</b>	<b>5</b>
1 Відомості з геометричної оптики. Принцип Гюйгенса .....	5
2 Загальні відомості з хвильової оптики .....	8
<b>26 Інтерференція світла .....</b>	<b>9</b>
1 Інтерференція світла та умови її спостереження. Інтерференція від двох точкових когерентних джерел світла. ....	9
2 Особливості світлових хвиль. Часова та просторова когерентність світлових потоків. Принципи отримання когерентних світлових потоків .....	13
3 Інтерференція світла в тонких плівках. Смуги рівного нахилу та рівної товщини. Кільця Ньютона.....	16
4 Практичне використання інтерференції .....	19
<b>27 Дифракція світла .....</b>	<b>19</b>
1 Дифракція хвиль. Дифракція світла. Принцип Гюйгенса-Френеля. Метод зон Френеля .....	19
2 Дифракція Френеля від круглого отвору в діафрагмі та від круглого екрану. Світле м'ятно Пуассона.....	22
3 Дифракція Фраунгофера. Роль лінзи в спостереженні дифракційної картини. Таутохронізм оптичних систем. Дифракція від щілини та двох щілин між на півплощинами.....	24
4 Дифракційна ґратка. Формула ґратки. Характеристики дифракційної ґратки як спектрального пристрою .....	26
5 Дифракція рентгенівських променів .....	29
<b>28 Поляризація світла.....</b>	<b>30</b>
1 Поляризація хвиль. Види поляризації. Закон Малюса .....	30
2 Поляризація світла при проходженні границі розподілу двох прозорих діелектриків. Закон Брюстера. Стовпчик Столетова.....	32
3 Поляризація світла в оптично анізотропних середовищах. Подвійне променезаломлення. Призма Ніколя. Дихроїзм. Поляріди.....	33
4 Інтерференція поляризованого світла. Кольори тонких кристалічних пластинок .....	35
5 Штучна оптична анізотропія. Аналіз пружних деформацій. Ефект Керра. ....	35
<b>29 Теплове випромінювання .....</b>	<b>37</b>
1 Види електромагнітного випромінювання. Теплове випромінювання. Рівноважність теплового випромінювання. Характеристики теплового випромінювання та їх взаємозв'язок. ....	37
2 Закони теплового випромінювання. Універсальна функція Кірхгофа. Абсолютно чорне та сіре тіла .....	39
3 Елементи теорії теплового випромінювання. Формула Планка та гіпотеза Планка.....	41
3 Поняття про оптичну пірометрію.....	45
<b>30 Квантова оптика.....</b>	<b>47</b>

1 Загальні відомості з квантової оптики.....	47
2 Явища фотоелектричного ефекту. Закони фотоефекту.....	49
3 Ефект Комптона та його теорія.....	52
<b>VIII Квантова механіка.....</b>	<b>55</b>
<b>31 Елементи квантової механіки .....</b>	<b>55</b>
1 Гіпотеза де Бройля та її дослідне обґрунтування.....	55
2 Хвилі де Бройля. Псі-функція та її фізичний зміст .....	57
3 Співвідношення невизначеностей Гейзенберга .....	58
4 Рівняння Шредінгера. Стаціонарне рівняння Шредінгера та стандартні вимоги до $\psi$ -функції. ....	59
<b>32 Елементарні задачі квантової механіки .....</b>	<b>60</b>
1 Частинка в прямокутному одномірному ящику з нескінченно високими стінками .....	61
2 Квантовий гармонійний осцилятор .....	63
3 Поводження частинки на прямокутному одномірному потенціальному бар'єрі. Тунельний ефект. ....	66
<b>33 Елементи фізики атомів.....</b>	<b>69</b>
1 Відомості з фізики атомів.....	69
<b>34 Квантова теорія атома водню і воднеподібних іонів .....</b>	<b>72</b>
1 Узагальнення рівняння Шредінгера .....	72
2 Рівняння Шредінгера для атома водню та воднеподібних іонів. Квантування енергії, моменту імпульсу та проекції моменту імпульсу. Вироджені стани електрона та кратність їх виродження за енергією .	74
3 Вироджені стани електрона та кратність їх виродження за енергією. Спектр атома водню та воднеподібних іонів .....	76
4 Стани електронів в атомі водню. Електронні хмари. Електронні орбіталі. ....	77
5 Спін електрона. Досліди Штерна і Герлаха. Стани електронів в атомі водню та воднеподібних іонів .....	79
<b>35 Багатоелектронні атоми .....</b>	<b>81</b>
1 Особливості дослідження багатоелектронних атомів квантовою механікою. Енергетичні шари. Принцип Паулі. Принцип нерозпізнаності тотожних частинок. Пояснення закономірностей таблиці елементів ..	81
2 Рентгенівське випромінювання. Суцільний та лінійчатий рентгенівські спектри. ....	84
<b>36 Молекули. Молекулярні спектри.....</b>	<b>86</b>
1 Молекули. Види хімічних зв'язків і типи молекул. Ковалентний зв'язок	86
2 Особливості молекулярних енергетичних спектрів. Комбінаційне розсіювання. Поняття про радіоспектроскопію.....	88
3 Поглинання і випромінювання енергії молекулами. Вимушене випромінювання . Принципи роботи квантових генераторів. ....	90
<b>IX Основи фізики твердого тіла.....</b>	<b>93</b>
<b>37 Тверді тіла. Класифікація твердих тіл за типами сил зв'язку.....</b>	<b>93</b>
<b>38 Загальні відомості з квантової теорії твердих тіл .....</b>	<b>95</b>

1	Поняття про квантову статистику. Розподіл станів та функції заповнення Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака .....	95
2	Поняття про виродження квантових систем. Вироджений бозе-газ та формула Планка .....	97
<b>39</b>	<b>Теплоємність твердих тіл .....</b>	<b>99</b>
1	Проблеми класичної теорії теплоємності твердих тіл. Закон Дюлонга-Пті. Теорія теплоємності кристалів Ейнштейна .....	99
2	Теорія теплоємності кристалів за Дебаєм .....	102
<b>40</b>	<b>Елементи зонної теорії твердого тіла .....</b>	<b>104</b>
1	Загальні поняття про енергетичні зони в кристалах та основні висновки зонної теорії. ....	104
2	Динаміка руху електронів в кристалі. Особливості функції розподілу Фермі-Дірака .....	106
3	Класифікація твердих тіл по електропровідності .....	109
<b>41</b>	<b>Напівпровідники та їх електричні властивості .....</b>	<b>111</b>
1	Електричні властивості напівпровідників .....	111
2	Електрична провідність власних напівпровідників .....	112
3	Провідність домішкових напівпровідників .....	115
4	Контактні явища в напівпровідниках. Властивості p-n-переходу .....	118
<b>42</b>	<b>Теплові та електричні властивості металів .....</b>	<b>121</b>
1	Теплоємність металічних кристалів. Вироджений фермі-газ електронів в металі. Енергія Фермі. Теплоємність електронного газу .....	121
2	Термоелектрична емісія. Контактні електричні явища в металах. Термоелектронні явища: Зеебека, Пельтьє і Томсона .....	123

## VII Оптика

### 25 Загальні відомості з оптики. Геометрична та фізична оптика

Оптика - це наука про світлові явища. Світло – це суб'єктивні відчуття, що створюються в органах зору під дією електромагнітного випромінювання. Оптика світлом називає електромагнітне випромінювання з довжиною хвилі  $\lambda$  від 0,4 мкм до, приблизно, 0,75 мкм, які викликають відчуття світла. До світлового діапазону відносять також інфрачервоне ( $\lambda > 0,75$  мкм) і ультрафіолетове ( $\lambda < 0,4$  мкм) випромінювання.

Оптика ділиться на геометричну і фізичну. Геометрична оптика вивчає закономірності розповсюдження світла без вияснення фізичної природи явища. Фізична оптика навпаки, виходить з конкретних уявлень про природу світла, і на їх основі пояснює ті чи інші світлові явища. Виходячи з уявлень про природу світла, фізична оптика в свою чергу, поділяється на хвильову і квантову.

#### 1 Відомості з геометричної оптики. Принцип Гюйгенса

В основі геометричної оптики лежать дослідні закони. Основними поняттями є: 1) джерело світла і, як модельне тіло, точкове джерело світла – джерело світла, геометричними розмірами якого можна нехтувати і яке випромінює рівномірно в усіх напрямках; 2) промінь – напівпряма, що має початок на джерелі і вказує напрямком розповсюдження світла; 3) світловий пучок, як частина світлового потоку, обмеженого розмірами тілесного кута. Пучки можуть бути збіжними, розбіжними та паралельними.

Ми будемо розглядати закономірності розповсюдження світла тільки в абсолютно прозорих, однорідних і, як правило, ізотропних середовищах, властивості яких змінюються раптово на границі поділу, яка є поверхнею правильної геометричної форми. За формою цих поверхонь розрізняють плоску, сферичну і таке інше оптики.

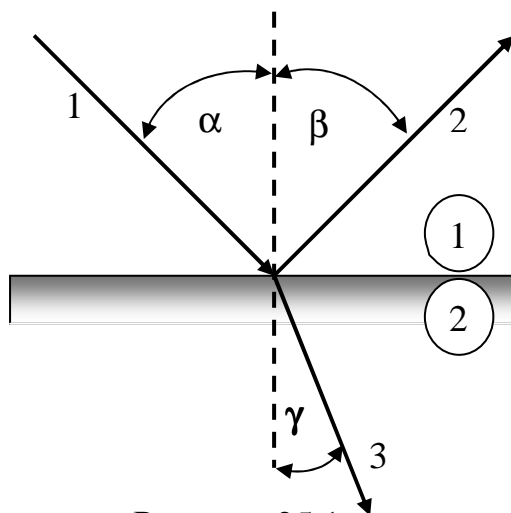


Рисунок 25.1

В таких середовищах світло розповсюджується прямолінійно, проміні не змінюють свого напрямку (закон прямолінійності розповсюдження світла). Всі зміни в напрямках розповсюдження світла відбуваються на границі поділу середовищ (рис. 25.1), де світло може відбиватись назад і заломлюватись, переходячи в інше. На границі поділу середовищ світло частково відбивається назад, а частково переходить у наступне середовище; падаючий промінь (1 на рис. 25.1)

роздвоюється на відбитий 2 і заломлений 3. Хід цих променів підкоряється таким законам: 1) промінь падаючий, відбитий і перпендикуляр, поставлений в точці падіння до границі поділу середовищ, лежать в одній площині (див. рис. 25.1), що називається площиною падіння променів; 2) кут падіння дорівнює куту відбивання:  $\alpha = \beta$  (див. рис. 25.1); 3) відношення синуса кута падіння  $\alpha$  (див. рис. 25.1) до синуса кута заломлення  $\gamma$  не залежить від кута падіння, є константою для даних двох середовищ і називається показником заломлення другого середовища по відношенню до першого:  $n_{21} = \frac{\sin \alpha}{\sin \gamma}$ .

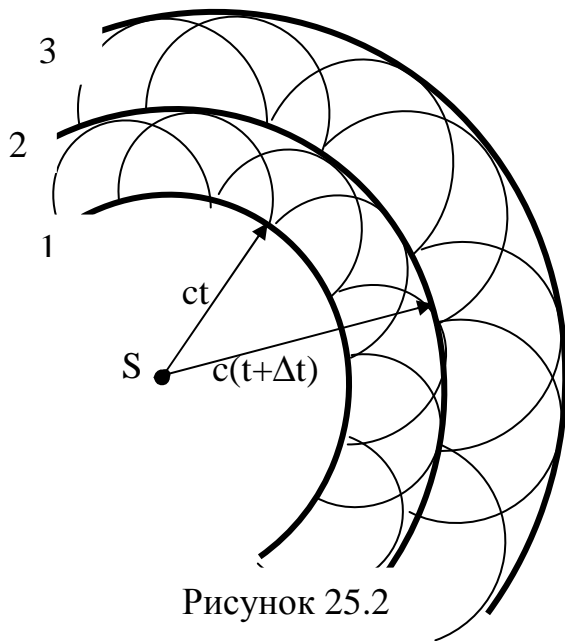


Рисунок 25.2

Як це видно з рисунка, **кутами падіння, відбивання і заломлення** називаються кути, утворені відповідними променями з перпендикуляром до границі поділу середовищ, поставленому у точці падіння променя.

Фізичний зміст показника заломлення світла дозволяє встановити **принцип Гюйгенса**, формулювка якого базується на хвильових уявленнях про природу світла. Принцип дозволяє побудувати положення фронту<sup>1</sup> хвилі (рис. 25.2) у довільний момент часу, виходячи з початкового положення фронту.

Він стверджує, що кожна точка середовища і фронту хвилі, якої досяг хвильовий процес, стає джерелом нових, сферичних в однорідному ізотропному середовищі, хвиль. Нове положення фронту визначається як поверхня, огинаюча всі вторинні хвильові поверхні.

Для побудови нового положення фронту хвилі через проміжок часу  $\Delta t$  в точках попереднього положення фронту 1 для моменту часу  $t$  будуємо сферичні поверхні радіусом  $c\Delta t$  (див. рис. 25.2). Положення 2 фронту хвилі в момент часу  $t + \Delta t$  отримаємо як огинаючу цих вторинних сфер. Аналогічно будується положення фронту 3 і так далі.

З аналізу рис. 25.3 видно, що

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \gamma} = \frac{u_1 t}{u_2 t} = \frac{u_1}{u_2}, \quad (25.1)$$

тобто

<sup>1</sup> Фронтом хвилі називають поверхню, що розділяє точки збудженого хвильовим процесом середовища, від точок ще не втягнутих у хвильовий процес.

$$n_{21} = \frac{u_1}{u_2}. \quad (25.2)$$

Якщо першим середовищем є вакуум, то **показник заломлення** називається **абсолютним**, в інших випадках це **відносний показник заломлення**. Абсолютний показник заломлення є константою даного середовища, величиною табличною. Його прийнято зображати з одним індексом:

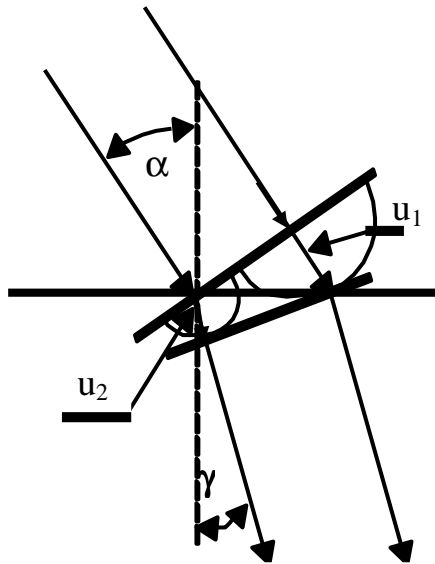


Рисунок 25.3

$$n_1 = \frac{c}{u_1}, n_2 = \frac{c}{u_2},$$

$$n_{\text{скла}} = \frac{c}{u_{\text{скла}}}, n_{\text{води}} = \frac{c}{u_{\text{води}}} \quad (25.3)$$

і таке інше, де  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$  - швидкість світла в вакуумі.

Співставлення виразів (25.3) і (25.1) дає можливість виразити відносний показник заломлення двох середовищ через їх абсолютні показники:

$$n_{21} = \frac{\sin \alpha}{\sin \gamma} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{n_2}{n_1}. \quad (25.4)$$

Абсолютний показник заломлення світла визначає оптичну густину середовища. Наприклад для скла  $n = 1,55$ , для води  $n = 1,33$ , а для алмаза  $n = 2,2$ , тому скло оптично густіше за воду, але менш густе ніж алмаз.

Якщо світло переходить з оптично менш густого середовища в більш густе, кут заломлення є меншим за кут падіння [див. формулу (25.3) і рис. 25.1]:  $\gamma < \alpha$ , заломлений промінь прихиляється до перпендикуляра. Якщо навпаки, світло переходить у менш густе середовище, то заломлений промінь відходить від перпендикуляра  $\gamma > \alpha$ . В цьому останньому випадку

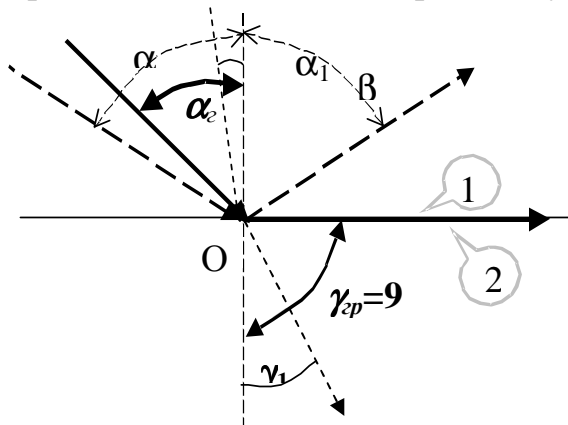


Рисунок 25.4

може спостерігатись явище **повного внутрішнього відбивання**, коли кут заломлення сягає  $90^\circ$ , після чого збільшення кута падіння приводить до переходу променя в те середовище, з якого він прийшов – настає **повне внутрішнє відбивання**. Кут падіння, при якому кут заломлення дорівнює  $90^\circ$  і заломлений промінь ковзає по поверхні поділу середовищ (рис. 25.4), називається **граничним кутом повного внутрішнього відбивання**. Він

визначається співвідношенням

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

$$\sin \alpha_{ep} = n_{21} = \frac{n_2}{n_1}. \quad (25.4)$$

Явище повного внутрішнього відбивання використовується у поворотних і оборотних призмах, в яких, відповідно, промінь повертається назад, або змінює свій напрям по іншому, або хід променів через призму такий, що зображення предметів перетворюється із зворотного на пряме, чи навпаки.

## 2 Загальні відомості з хвильової оптики

Хвильова оптика розглядає світло як електромагнітні хвилі частотного діапазону від  $0,4 \cdot 10^{15}$  Гц до  $0,76 \cdot 10^{15}$  Гц, що викликають суб'єктивні відчуття світла. Електромагнітна хвиля - це електромагнітне поле, що розповсюджується взаємопороджуючими вихровими електричними і магнітними полями, з швидкістю

$$u = \frac{c}{\sqrt{\epsilon\mu}}, \quad (25.5)$$

де  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с - швидкість світла у вакуумі;  $\epsilon$  - діелектрична проникність, а  $\mu$  - магнітна проникність середовища. Показник заломлення світла, як це слідує з його визначення [див. формули (25.3) та (25.3)]

$$n = \frac{c}{u} = \sqrt{\epsilon\mu}. \quad (25.6)$$

В електромагнітній хвилі електричне і магнітне поля змінюються у взаємно перпендикулярних напрямках, які є перпендикулярними до напрямку розповсюдження (рис. 25.5).

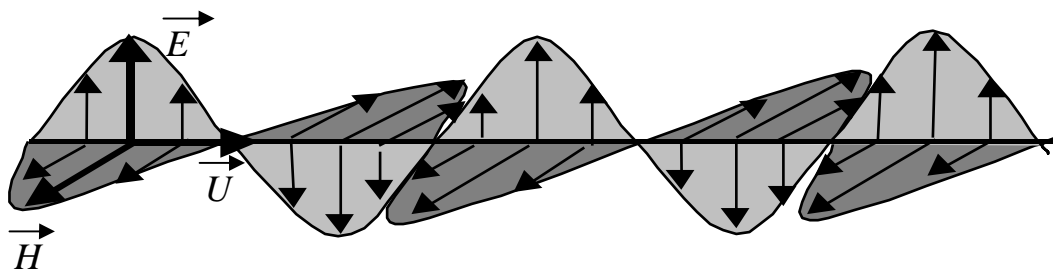


Рисунок 25.5

У кожному мить напруженості електричного і магнітного полів пропорційні одна одній, а густини енергій рівні:

$$\frac{\varepsilon\varepsilon_0 E^2}{2} = \frac{\mu\mu_0 H^2}{2} \quad (25.7)$$

і змінюються в однакових фазах. Основною енергетичною характеристикою електромагнітних хвиль є вектор Пойнтінга:

$$\vec{J} = \vec{E} \times \vec{H}. \quad (25.8)$$

Електромагнітні хвилі як світло, тобто хвилі певного діапазону, мають деякі особливості. Магнітна проникність прозорих для світла речовин  $\mu \approx 1$ , тобто вони не взаємодіють з магнітним полем такого частотного діапазону. Крім того, біологічна дія світла пов'язана з електричним полем хвилі. Зважаючи на це, при розгляді світла, як правило, оперують тільки з вектором електричного поля, який називають **світловим вектором**. Основною енергетичною характеристикою світла є його **інтенсивність** ( $I$ ), яка пропорційна модулю вектора Пойнтінга.

Зважаючи на особливості світла і на співвідношення (25.7) та (25.8) маємо

$$I \approx |\vec{J}| = E^2, \quad (25.9)$$

і тобто *інтенсивність світла пропорційна квадрату модуля світлового вектора*, а показник заломлення світла

$$n = \sqrt{\varepsilon} \quad (26.1)$$

## 26 Інтерференція світла

1 *Інтерференція світла та умови її спостереження. Інтерференція від двох точкових когерентних джерел світла.*

2 *Особливості природного світла. Часова та просторова когерентність світла. Принципи отримання когерентних світлових потоків*

3 *Інтерференція світла в тонких плівках. Смуги рівної товщини та рівного нахилу. Кільця Ньютона.*

4 *Практичне використання інтерференції.*

1 *Інтерференція світла та умови її спостереження. Інтерференція від двох точкових когерентних джерел світла.*

**Інтерференція** є типово хвильовим явищем, яке обумовлене особливостями додавання коливань при накладанні хвильових процесів з однаковими напрямками коливань і полягає в виникненні стійкого перерозподілу енергії в просторі. Додавання коливань підкоряється принципу незалежності, а коливання можуть приходити до досліджуваної ділянки простору в однаковій фазі і тоді вони підсилюють одне одного, або в протифазах і тоді коливання взаємно послаблюються.

Досвід вчить, що для світла в певних умовах спостерігається інтерференція. Це свідчить, що світло має хвильову природу.

**Інтерференція світла** – це явище стійкого просторового перерозподілу інтенсивності світла; створення стійких максимумів і мінімумів освітленості, або створення стійкого інтерференційного забарвлення в випадках накладання світлових потоків складного, білого наприклад, світла. Видима картина інтерференції є послідовність світлих і темних, або кольорових смуг.

Завдання теорії полягає в тому, щоб 1) пояснити чому світло дає картину інтерференції; 2) встановити умови її спостереження і 3) дати апарат розрахунку картини інтерференції.

Світло дає картину інтерференції тому, що воно має хвильову природу. Для одержання відповідей на решту проблем познайомимося більш детально з умовами спостереження інтерференції і з деякими особливостями світла.

Розглянемо додавання двох плоских гармонійних хвиль:

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

та

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

(26.1)

з співнаправленими коливаннями (див. рис. 25.5). Результируючий процес  $\xi = \xi_1 + \xi_2$  і за методом, наприклад, векторних діаграм (див. п. 19.2) маємо для довільного моменту часу:  $A^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos(\Phi_2 - \Phi_1)$ , або, тому, що інтенсивність хвильового процесу пропорційна квадрату амплітуди, маємо:

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\Phi_2 - \Phi_1). \quad (26.2)$$

Результат додавання залежить від зсуву фаз  $\Phi_2 - \Phi_1$ , який в свою чергу складним чином залежить від частот  $\omega_1, \omega_2$ ; хвильових чисел

$k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1}, k_2 = \frac{2\pi}{\lambda_2}$  і таке інше [див. формули (26.1)]. Якщо зсув фаз не стійкий, то середнє значення косинуса в виразі (26.2) дорівнює нулю і інтенсивність результуючого процесу дорівнює сумі інтенсивностей складових – інтерференція відсутня [див. рівняння (26.2)]. Якщо зсув фаз стійкий, то результат додавання залежить від його величини. В тих місцях, де  $\cos(\Phi_2 - \Phi_1) = 1$ , маємо інтенсивність  $I = I_1 + I_2 + \sqrt{2I_1 I_2} > I_1 + I_2$ , тобто підсилення інтенсивності світла, а в тих місцях, де  $\cos(\Phi_2 - \Phi_1) = -1$ , маємо інтенсивність  $I = I_1 + I_2 - \sqrt{2I_1 I_2} < I_1 + I_2$ , тобто послаблення інтенсивності світла.

Таким чином за умови сталості зсуву фаз маємо просторовий перерозподіл інтенсивності і інтерференція має місце. Хвильові процеси з сталим зсувом фаз називаються *когерентними*. Когерентність хвильових процесів є необхідною умовою спостереження інтерференції, а умова підсилення інтенсивності:

$$\Delta\Phi_{\max} = \Phi_2 - \Phi_1 = 2k\pi, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (26.3)$$

коли косинус дорівнює одиниці, носить назву *умови максимуму інтерференції*. Відповідно умова

$$\Delta\Phi_{\min} = \Phi_2 - \Phi_1 = (2k + 1)\pi, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (26.4)$$

є *умова мінімуму інтерференції*

Для таких швидкоплинних процесів, якими є світло, досягти стійкого зсуву фаз і когерентності світлових хвиль можливо тільки за умови, що частоти коливань співпадають або досить близькі. Можна вважати, не порушуючи загальності розгляду, що початкові фази коливань збудників хвиль однакові, тобто, що  $\alpha_1 = \alpha_2$ . За таких умов зсув фаз

$$\Delta\Phi = (\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1), \quad (26.5)$$

або, якщо зважити на те, що вектори  $\vec{k}$  і  $\vec{r}$  паралельні, можна записати:

$\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i = \frac{2\pi s_i}{\lambda_i}$ , де  $s_i$  – шлях, пройдений світлом в  $i$ -тому середовищі. Відомо,

що показник заломлення середовища  $n_i = \frac{\lambda_0}{\lambda_i}$ , тому  $\lambda_i n_i = \lambda_0$ . Зважаючи на

такі застереження, маємо для зсуву фаз (формула (26.5)):

$$\Delta\Phi = \frac{2\pi s_2}{\lambda_2} - \frac{2\pi s_1}{\lambda_1} = \frac{2\pi s_2 n_2}{\lambda_0} - \frac{2\pi s_1 n_1}{\lambda_0} = \frac{2\pi}{\lambda_0} (s_2 n_2 - s_1 n_1). \quad (26.6)$$

**Оптичний шлях. Оптична різниця ходу променів.** В формулі (26.6) вираз  $s_i n_i$  презентує так званий *оптичний шлях світла* в  $i$ -тому середовищі. Якщо світло відбивається від оптично більш густого середовища, його фаза змінюється на протилежну, що рівнозначно втраті половини довжини хвилі. Ця втрата також включається в оптичний шлях. Тому *оптичним шляхом світла* називається фізична величина, що дорівнює добутку геометричного шляху, пройденого світлом в деякому середовищі, на показник заломлення цього середовища за винятком половини довжини хвилі, якщо було відбивання від більш густого середовища:

$$L_i = s_i n_i \left(-\frac{\lambda_0}{2}\right). \quad (26.7)$$

Фізична величина, що визначається як різниця оптичних шляхів, називається *оптичною різницею ходу* світла:

$$\Delta = L_2 - L_1. \quad (26.8)$$

З врахуванням рівностей (26.7) і (26.8) рівняння (26.6) переписується так:

$$\Delta\Phi = \frac{2\pi}{\lambda_0} (L_2 - L_1) = \frac{2\pi}{\lambda_0} \Delta, \quad (26.9)$$

а *умови максимуму і мінімуму інтерференції* [формули (26.8) і (26.9)] матимуть такий вигляд:

$$\Delta_{\max} = k\lambda_0 = 2k \frac{\lambda_0}{2} \quad \text{і} \quad \Delta_{\min} = (2k + 1) \frac{\lambda_0}{2}; k = 0, 1, 2, \dots \quad (26.10)$$

Таким чином маємо відповіді на решту питань, що ставляться теорією інтерференції: 2) щоб інтерференція спостерігалась необхідно додавати когерентні світлові потоки; 3) для розрахунку картини інтерференції необхідно визначити оптичну різницю ходу світлових потоків і співставити її з умовами максимумів і мінімумів інтерференції (26.10).

Розглянемо розрахунок картини інтерференції від двох точкових когерентних джерел світла в вакуумі (рис. 26. 2).

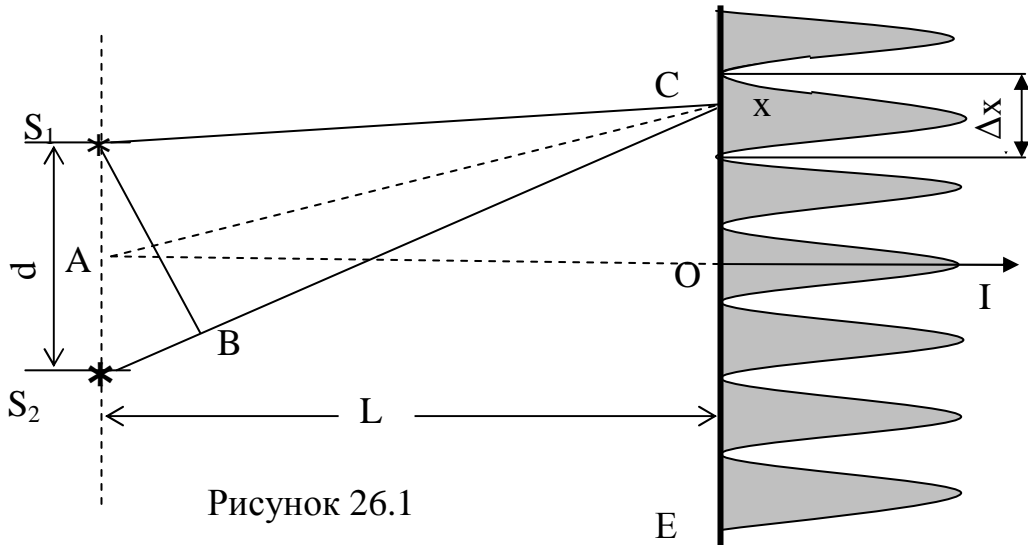


Рисунок 26.1

Два точкові когерентні джерела світла  $S_1$  та  $S_2$  розташовані на відстані  $d$  одне від одного. Картина інтерференції спостерігається на екрані  $E$ , що знаходиться на відстані  $L$  від площини, в якій знаходяться джерела світла. Для розрахунку інтерференційної картини в точці  $C$  (з координатою  $x$ ) екрану, досить визначити оптичну різницю ходу променів  $S_1C$  та  $S_2C$  і співставити її з умовами максимумів та мінімумів інтерференції світла (26.10). Досвід вказує на те, що картина інтерференції світла спостерігається за умов коли  $d \ll L$ , а також  $x \ll L$ . Тому оптична різниця ходу променів у вакуумі співпадає з геометричною різницею довжин відстаней від джерел світла до досліджуваної точки екрану:  $\Delta = S_2C - S_1C \approx S_2B$ .

З подібності трикутників  $S_2 S_1 B$  та  $CAO$  маємо, що

$$\Delta = x \frac{d}{L}; \quad x = \frac{L}{d} \Delta. \quad (26.11)$$

Скориставшись умовою максимуму інтенсивності світла, отримаємо координати максимумів на екрані спостереження:

$$x_k = k \frac{L\lambda}{d}; \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (26.12)$$

На екрані рис. 26.1 цим точкам відповідають максимуми графіка інтенсивності  $I$  світла.

В точках екрану з координатами

$$x_m = (2m + 1) \frac{L\lambda}{2d}; \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (26.13)$$

спостерігаються мінімуми інтенсивності світла, або його повне погашення.

Відстань між двома сусідніми мінімумами інтерференції носить назву **ширини інтерференційної смуги**:

$$\Delta x = x_{m+1} - x_m = \frac{L\lambda}{d}, \quad (26.14)$$

залежить від відстані між джерелами світла і якщо відстань між ними велика інтерференційні смуги будуть надто близько і, тому що кожна смуга має свою ширину, картина інтерференції бути невидимою.

**Умова видимості картини інтерференції.** Картина інтерференції є **видимою**, якщо інтенсивності світла в максимумі і в мінімумі зв'язані критерієм видимості:

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} \quad (26.15)$$

і якщо він не менший за 0,1, тобто  $I_{\max} \geq 0,82I_{\min}$ .

## 2 Особливості світлових хвиль. Часова та просторова когерентність світлових потоків. Принципи отримання когерентних світлових потоків

Як було сказано вище, світло за своєю природою є електромагнітні хвилі. Завдяки особливостям взаємодії світла з прозорими середовищами в хвильовій оптиці світло розглядають як процес розповсюдження коливань **світлового вектора** (див. п. 26.1). Світло, що випромінюється звичайними джерелами є результатом неузгодженого ні за напрямком коливань світлового вектора, ні за початковою фазою, ні навіть за частотою випромінювання окремих атомів. Більше того, випромінювання окремого атома принципово не може бути монохроматичним, тому що акт випромінювання триває кінцевий проміжок часу. Маючи періоди наростання, встановлений процес та згасання, випромінювання окремого атома, так званий **цуг хвиль**, може бути представлений суперпозицією гармонійних хвиль частотного діапазону  $(\omega \pm \Delta\omega/2)$ . Цуг хвиль може приймати участь у створенні картини інтерференції за умови, що зсув фаз між центром частотного діапазону та його границею не перевищує  $\pi$ , тобто щоб коливання від центру не знищувались коливаннями від інших складових цугу:

$$\left( \omega + \frac{\Delta\omega}{2} \right) t - \omega t \leq \pi \Rightarrow \Delta\omega t \leq 2\pi. \text{ Граничне значення дозволеного часу}$$

$$\tau = \frac{2\pi}{\Delta\omega} \quad (26.16)$$

носить назву **часу когерентності цугу**, а відстань, що визначається часом когерентності

$$l_{\text{коз}} = c \tau = \frac{2 \pi c}{\Delta \omega}, \quad (26.17)$$

де  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с - швидкість розповсюдження світла у вакуумі, називається **когерентною довжиною цугу**.

Якщо вважати, що час когерентності цугу визначається часом життя збудженого стану атом, переходом з якого відбувається випромінювання і який складає проміжок  $\Delta t \sim 10^{-8}$  с =  $\tau$ , то  $l_{\text{коз}} \sim 3$  м, тобто це досить суттєва довжина. Але випромінювання окремих атомів зникаючи слабке, а узгоджене випромінювання великої кількості атомів можливе тільки в спеціальних пристроях, в так званих одномодових лазерах, де когерентна довжина може бути навіть суттєво більшою за наведене вище її значення, реальні, природні та штучні джерела світла, мають неузгоджене випромінювання окремих атомів. Когерентна довжина випромінювання природних джерел світла досить мала і для отримання когерентних світлових потоків користуються штучними прийомами.

**Для отримання когерентних світлових потоків** необхідно один світловий потік розділити, зробити два, або декілька, створити зсув фаз, а потім накласти їх. Тобто дати можливість додавати хвилі, що випромінюються за один акт випромінювання одними і тими ж атомами.

Світло, що використовується для спостереження інтерференції має довжини хвиль в деякому діапазоні  $\left( \lambda \pm \frac{\Delta \lambda}{2} \right)$ . Інтерференційна картина від різних ділянок спектру призводить до її стушовування завдяки перекриванню їх максимумів і мінімумів. За **критерієм Релея** інтерференція видима, доки максимум з границі спектру не співпадає з мінімумом від центру спектральної смуги. Тобто має місце рівність оптичних шляхів:  $m_{\text{о}} \left( \lambda + \frac{\Delta \lambda}{2} \right) = (2m_{\text{о}} + 1) \frac{\lambda}{2}$ , де  $m_{\text{о}}$  – номер максимально допустимої, ще видимої інтерференційної смуги.

За цим критерієм  $m_{\text{о}} = \frac{\lambda}{\Delta \lambda}$ , що дає можливість визначити так звану

**когерентну довжину випромінювання:**

$$l_{\text{коз}} = m_{\text{о}} \lambda = \frac{\lambda^2}{\Delta \lambda}; \quad l_{\text{коз}} = \frac{\lambda^2}{\Delta \lambda}. \quad (26.18)$$

Наприклад, якщо сонячне світло видимого діапазону має довжини від 0,4 мкм до 0,75 мкм, то  $\lambda \approx 0,52$  мкм, а  $\Delta \lambda = 0,35$  мкм, тому  $l_{\text{коз}} \approx 0,77$  мкм, тобто досить мала в межах однієї інтерференційної смуги. Для збільшення когерентної довжини і тим самим для збільшення кількості інтерференційних смуг, які можна спостерігати, необхідно звужити, як це видно з формули (26.18), інтервал  $\Delta \lambda$ . Звуження досягається за допомогою світлофільтрів. Гарні інтерференційні фільтри дозволяють спостерігати десятки і навіть сотні інтерференційних смуг.

Умова (26.18) визначає **часову когерентність світла**. Справа в тому, що ця умова рівнозначна іншій, яка визначає **час когерентності випромінювання**:

$$l_{\text{ког}} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{2\pi c}{\Delta\omega} = c\tau_{\text{ког}}; \quad \tau_{\text{ког}} = \frac{l_{\text{ког}}}{c} = \frac{2\pi}{\Delta\omega} \quad (26.19)$$

де  $c$  – швидкість світла;  $\Delta\omega$  - інтервал частот світла, що використовується. Формально за критерієм Релея ми отримали результат аналогічний часу когерентності цугу атомів (26.17), але він має певну внутрішню відмінність.

Картину інтерференції можливо спостерігати, якщо оптична різниця ходу не перевищує когерентної довжини:

$$\Delta \leq l_{\text{ког}} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} \quad (26.20)$$

Крім часової інтерференції, можливість спостереження інтерференції потребує дотримання **умови просторової когерентності джерела світла**.

Створення потужних світлових потоків потребує збільшення розмірів випромінюючої поверхні, що в свою чергу призводить до стушовування картини інтерференції. Умови виникнення інтерференції світла від різних ділянок випромінювача є різні, максимума інтерференції від одних ділянок можуть накладатись на мінімуми від інших – картина стає не видимою [див. критерій (26.15)]. Розміри джерела світла, таким чином, повинні бути оптимальними. Критерієм оптимальності і виконання **умови просторової когерентності джерела світла** є його радіус когерентності.

Принципова схема спостереження картини інтерференції наведена на рис. 26.2. Від джерела світла, допустимі розміри  $\rho$  якого визначаються, світло потрапляє в поділювач  $S_1S_2$  під кутом  $2\alpha$  (**апертура інтерференції**) після чого, уже від двох штучних джерел  $S_1$  і  $S_2$ , розповсюджується до екрану спостереження  $E$ .

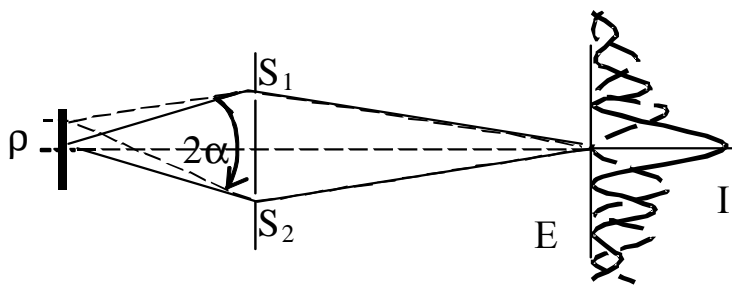


Рисунок 26.2

Можливі графіки розподілу інтенсивностей світла  $I$ , в результаті інтерференції, наведені на рис. 26.2. Суцільною лінією зображено графік для світла, що йде від центральної частини джерела, а пунктиром - від

периферійної частини на віддалі  $\rho$  від центру. Оптична різниця ходу між цими потоками  $\Delta = 2\rho \sin\alpha$ . Вона не повинна перевищувати половини довжини хвилі, інакше інтерференційні максимума світла від центральної частини співпадуть з мінімумами від периферійних частин джерела світла.

Умова

$$\Delta = 2\rho \sin\alpha \leq \frac{\lambda}{2} \quad \text{звідки} \quad \rho \leq \frac{\lambda}{4\sin\alpha} \quad (26.21)$$

визначає так званий **радіус когерентності  $\rho$  джерела світла** і умову дотримання його просторової когерентності. **Радіус когерентності** залежить від довжини хвилі, але в першу чергу від кута входження світла в поділювач, від апертури інтерференції. Якщо цей кут прагне до нуля, то допустимі розміри джерела можуть бути досить значними, як це є, наприклад, для сонячного світла.

*3 Інтерференція світла в тонких плівках. Смуги рівного нахилу та рівної товщини. Кільця Ньютона*

Явище інтерференції світла має досить широке розповсюдження і практичне використання. Інтерференцією світла пояснюється забарвлення тонких прозорих плівок масла, бензину тощо на поверхні води, забарвлення мильних бульбашок і таке інше. Інтерференція використовується для так званого просвітлення оптичних лінз, де на лінзу наноситься тонка плівка, що дає максимум інтерференції в променях, що проходять через лінзу і мінімум для відбитого проміння. Світловий потік відбивається від однієї і другої поверхонь плівок і після накладання відбитих потоків, якщо виконуються умови часової (26.16), (26.18), (26.19) і просторової (26.21) когерентності, спостерігається картина інтерференції.

Для кількісної оцінки картини інтерференції розглянемо проходження паралельного потоку світла через плоско паралельну плівку (рис. 26.3) товщиною  $d$  з прозорого матеріалу з показником заломлення  $n$ . Плівка знаходиться у повітрі.

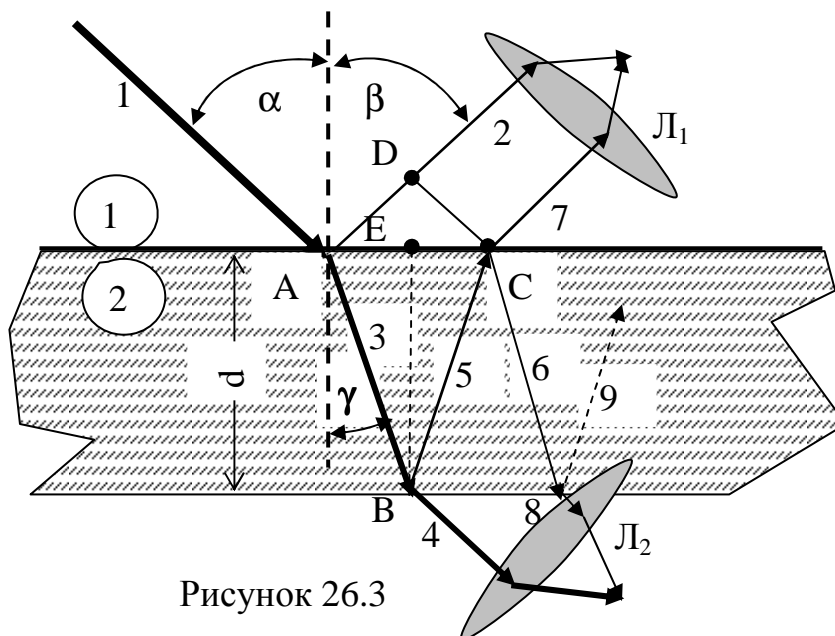


Рисунок 26.3

Світловий потік інтенсивності  $I_1$ , якому відповідає промінь 1, потрапляючи на поверхню плівки частково відбивається у повітря і частково заломлюється в матеріал плівки, а промінь 1 роздвоюється на промінь відбитий 2 та заломлений 3. В точці В промінь світла знову роздвоюється на

заломлений у повітря 4 та відбитий 5. В точці С промінь 5 роздвоюється на відбитий 6 та заломлений у повітря 7. Промінь 6 роздвоюється на заломлений 8 та відбитий 9. Потоки світла, зображені відповідно променями 2 та 7 і 4 та 8, у випадку, якщо оптична різниця їх ходу не перевищує когерентної довжини світла, дадуть картини інтерференції у відбитому світлі та у світлі що пройшло через плівку. Коефіцієнт відбивання світла прозорими плівками досить малий, тому інтенсивності світлових потоків  $I_1 \approx I_3 \approx I_4 \gg I_2 \approx I_5 \approx I_7 \gg I_6 \approx I_8 \gg I_9$ . Тобто потоком світла, що відповідає променеві 9 і далі вже можна нехтувати. У відбитому світлі картина інтерференції спостерігається досить яскраво, том що інтенсивності потоків світла 2 та 7 приблизно однакові і інтерференційне погашення майже до повної темноти, а на фоні темних смуг світлі інтерференційні смуги добре помітні.

У світла, що пройшло через плівку картина інтерференції помітна значно гірше тому, що інтенсивності відповідних світлових потоків ( $I_4 \gg I_8$ ) суттєво різні. Інтерференційна картина має слабкі коливання результуючої інтенсивності світла. Для спостереження картини інтерференції світло збирається за допомогою відповідних оптичних лінз  $L_1$  та  $L_2$ .

Оптична різниця ходу променів 2 та 7, що виникає до положення плоского фронту CD, з геометричних міркувань та з визначення показника заломлення (25.4) і того факту, що при відбиванні світла від оптично більш густого середовища плівки втрачається половина довжини хвилі

$$\Delta = (AB + BC)n - \left(AD - \frac{\lambda}{2}\right) = 2dncos\gamma + \frac{\lambda}{2} = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha} + \frac{\lambda}{2} \quad (26.22)$$

В прохідному світлі оптична різниця ходу відрізняється тільки відсутністю втрати половини довжини світлової хвилі, тому що відбивання світла відбувається від оптично менш густого середовища.

Таким чином умова підсилення світла і умова спостереження світлої смуги у відбитому світлі:

$$2dncos\gamma = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha} = (2k - 1)\frac{\lambda}{2}; k = 1, 2, 3, \dots \quad (26.23)$$

Одночасно – це умова мінімуму і умова існування більш темної смуги у прохідному світлі.

Умова темної інтерференційної смуги та умова мінімуму відбитого світла

$$2dncos\gamma = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2 \alpha} = k\lambda; k = 1, 2, 3, \dots \quad (26.24)$$

Одночасно – це умова максимуму і умова існування більш світлої смуги у прохідному світлі.

Оптична різниця ходу променів залежить як від товщини плівки, так і від кута падіння світла на поверхню плівки. Умовно виділяють **смуги рівної товщини** – це інтерференційне забарвлення, яке виникає під час освітлення паралельним світловим потоком плівок змінної товщини і **смуги рівного нахилу** для інтерференційного забарвлення в плівці рівної товщини, що освітлюється розбіжним потоком світла.

Для спостереження смуг рівного нахилу око спостерігача акомодується на нескінченність, тобто вони спостерігаються на нескінченності. Смуги рівної товщини, в залежності від кута падіння променів на плівку, можуть мати дійсне зображення безпосередньо над поверхнею плівки, або уявне – безпосередньо під нижньою поверхнею плівки.

Одним з прикладів інтерференційних смуг рівної товщини є так звані **кілець Ньютонa**. Це інтерференційна картина, що виникає за рахунок проходження світла в системі “плоско-опукла лінза – плоско-паралельна пластинка” (рис. 26.4). Вони спостерігаються за рахунок інтерференції світлових потоків відбитих від опуклої поверхні лінзи (В) з радіусом кривини  $R$  і ближньої поверхні пластинки (С). Якщо виконуються умови часової (26.19) і просторової (26.21) когерентності, спостерігається картина інтерференції. Світлові потоки, відбиті поверхнями відповідно А і С; А і D; В і D не відповідають цим умовам, вони не когерентні і в створенні картини інтерференції не приймають участі.

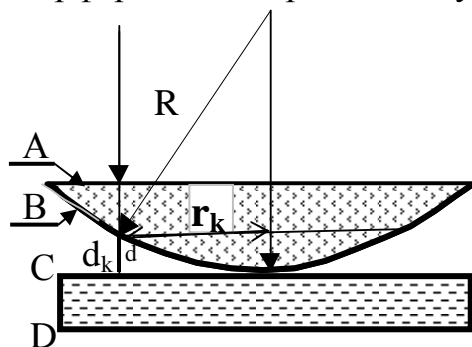


Рисунок 26.4

Для кількісного визначення картини знайдемо оптичну різницю ходу, що виникає в зазорі товщиною  $d_k$ , тобто в місті розташування  $k$ -того кільця з радіусом  $r_k$ :

$$\Delta = \left( d_k n - \frac{\lambda}{2} \right) + d_k n = 2d_k n - \frac{\lambda}{2}, \quad (26.25)$$

де  $n$ -показник заломлення світла середовищем, що заповнює зазор. З геометрії рис. 26.4 видно, що  $(2R - d_k)d_k = r_k^2$ , або,

тому що  $d_k \ll R$ , маємо  $2d_k = \frac{r_k^2}{R}$ , і  $2d_k = \frac{r_k^2}{R}$ , і  $\Delta = \frac{r_k^2}{R} n - \frac{\lambda}{2}$ .

Співставивши оптичну різницю ходу променів з умовами максимуму і мінімуму інтерференції (26.10), одержимо формули для розрахунку радіусів світлих і темних кілець Ньютонa в відбитих променях:

а) для світлих

$$\Delta_{\max} = \frac{r_k^2}{R} n - \frac{\lambda}{2} = 2k \frac{\lambda}{2} \Rightarrow r_k = \sqrt{(2k+1)R \frac{\lambda}{2n}}; \quad (26.26)$$

б) для темних

$$\Delta_{\min} = \frac{r_k^2}{R} n - \frac{\lambda}{2} = (2k-1) \frac{\lambda}{2} \Rightarrow r_k = \sqrt{kR \frac{\lambda}{n}}. \quad (26.27)$$

Як на те вказувалось раніше, картину кілець Ньютонa можна спостерігати і в прохідному світлі, хоча картина кілець буде менш виразною. Відповідно умова (26.31) є умовою мінімумів, тобто темних кілець, а умова (26.32) є умова спостереження світлих кілець Ньютонa в прохідному світлі.

#### *4 Практичне використання інтерференції*

Явище інтерференції використовується в ряді точних вимірювальних приладів, що носять назву **інтерферометрів**. Загальна ідея інтерферометрів полягає у розділенні світлового потоку на два з послідуєчим їх зведенні у зоровій трубці або іншому аналізуючому пристрої. Точне вимірювання полягає у співставленні оптичних шляхів різних світлових потоків. Точність вимірювання сягає десятих долів довжини хвилі, яка сама має порядок десятих долів мікрометру, тобто точність сягає порядку  $10^{-7}$ - $10^{-8}$  м.

Для визначення чистоти поліровки поверхні використовуються кільця Ньютона, де по формі кілець Ньютона мають інформацію про якість поверхні.

Оптичні системи мають той недолік, що відбите світло спотворює оптичні зображення. Оптичні лінзи покриваються тонким шаром прозорої речовини з таким розрахунком, щоб мати у відбитих променях інтерференційний мінімум, а в прохідних, навпаки, інтерференційний максимум для використаної довжини хвилі. Якщо використовується біле, складне світло, то вказані умови неможливо витримати для всього світлового діапазону. Розрахунок проводиться для середини світлового діапазону, тобто на зелене світло довжиною хвилі порядку 0,55 мкм. Для границь світлового діапазону, тобто для червоного світла та для синього, навпаки, спостерігається максимум у відбитих променях, та мінімум у прохідних. Відбите такими просвітленими лінзами світло має блакитне забарвлення, що складається з червоного та синього.

#### **27 Дифракція світла**

1 *Дифракція хвиль. Дифракція світла. Принцип Гюйгенса-Френеля. Метод зон Френеля.*

2 *Дифракція Френеля від круглого отвору в діафрагмі та від круглого екрану. Світле м'ятно Пуассона.*

3 *Дифракція Фраунгофера. Роль лінзи в спостереженні дифракційної картини. Таутохронізм оптичних систем. Дифракція від щілини та двох щілин між напівплощинами.*

4 *Дифракційна ґратка. Формула ґратки. Характеристики дифракційної ґратки як спектрального пристрою.*

5 *Дифракція рентгенівського випромінювання на просторовій ґратці. Формула Вульфа-Брегга.*

1 *Дифракція хвиль. Дифракція світла. Принцип Гюйгенса-Френеля. Метод зон Френеля*

**Дифракція** – це типово хвильове явище, яке полягає в заходженні хвиль в область геометричної тіні, іншими словами, призводить до

порушення прямолінійності розповсюдження хвиль. Досвід вчить, що дифракція світла спостерігається і це вказує на його хвильову природу.

Завдання теорії дифракції - пояснити явище і дати його кількісний опис, тобто дати опис розподілення інтенсивності світла за перепорою. Якісно явище дифракції пояснюється за допомогою **принципу Гюйгенса** (див. п. 25), який стверджує, що кожна точка середовища, до якої дійшла хвиля, стає джерелом нових сферичних (в ізотропному однорідному середовищі) хвиль. Тому хвилі заходять в область тіні - дифрагують, і, оскільки *світло теж дифрагує, то воно має хвильову природу*. Але щоб дифракція (світла наприклад) спостерігалась необхідно щоб інтенсивність дифрагованих хвиль (світла) була порівняною з інтенсивністю основного потоку. Висвітлення таких проблем потребує розрахунків картини дифракції.

Для кількісних розрахунків розподілу інтенсивності дифрагованого світла Френель доповнив принцип Гюйгенса принципом когерентності і інтерференції вторинного випромінювання.

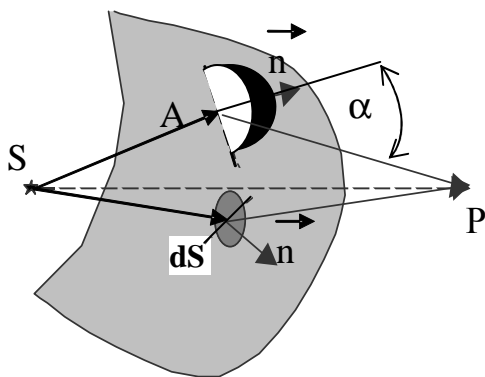


Рисунок 27.1

розподілу інтенсивності випромінювання на рис. 27.1). Розподіл інтенсивності дифрагованого світла розраховується як результат інтерференції вторинних хвиль, що прийшли у досліджувану точку (P на рис 27.1).

На практиці в якості світної поверхні вибирають хвильову поверхню, яка є сферичною (чи плоскою), або її відкриті частини. В такому випадку всі точки світної поверхні дають вторинне випромінювання з однаковою початковою фазою.

Сферична хвиля  $\xi_p$ , що приходить в досліджувану точку складним чином залежить від багатьох факторів:

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

де  $A_0$  - амплітуда коливань на світній поверхні;  $ds$  - площа елемента

поверхні;  $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$  - хвильовий вектор, а  $\vec{n}$  - хвильова нормаль (див. рис. 27.1);  $\lambda$  - довжина хвилі;  $\vec{r}$  - радіус-вектор досліджуваної точки;  $\vec{k} \cdot \vec{r} = kr \cos\alpha$  - скалярний добуток хвильового вектора і хвильової нормалі, а

**Принцип Гюйгенса-Френеля** полягає у тому, що джерело світла S (рис. 27.1) замінюється *світною, випромінюючою поверхню*, кожна точка якої є джерелом вторинних сферичних (в однорідному ізотропному середовищі) *когерентних* хвиль. Вторинне випромінювання посиляється максимально в напрямі хвильової нормалі  $\vec{n}$ , а по дотичній і назад воно відсутнє (див. кутову діаграму

$\alpha$  - кут між ними. Всі ці величини залежать від положення точки на поверхні, тому інтеграл досить складний і обраховується він в аналітичному вигляді тільки для повністю відкритої хвильової поверхні сферичної форми. Для спрощення розрахунків використовуються наближені методи, найбільш відомим і простим з яких є метод зон Френеля (рис. 27.2).

Щоб обчислити амплітуду коливань і, як наслідок, інтенсивність світла, що приходять в досліджувану точку, світну поверхню (ХП, рис. 27.2)

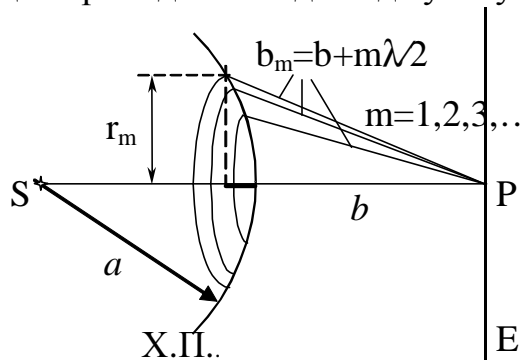


Рисунок 27.2

розбивають на кільцеві зони таким чином, щоб відстань до кожної наступної зони збільшувалась на половину довжини хвилі (див. рис. 27.2). Зони Френеля на хвильовій поверхні мають форму кілець, границі яких віддалені від досліджуваної точки P екрану спостереження E на відстанях  $b_m = b + m \frac{\lambda}{2}$ , де  $m=1, 2, 3, \dots$

В такому випадку дія попередньої зони компенсується дією наступної, тому що кожному променю однієї зони знайдеться промінь у наступній, що буде з ним у протифазі і гасить його. Таким чином, для розрахунку амплітуди світла, що прийшло в досліджувану точку, маємо співвідношення:

$$A = A_1 - A_2 + A_3 - \dots - (-1)^N A_N, \quad (27.1)$$

де  $A_i$  – амплітуда світла, що прийшло від  $i$ -тої зони Френеля.

Радіус  $m$ -ї зони Френеля (див. рис. 27.2):

$$r_m = \sqrt{\frac{ab}{a+b} m \lambda}. \quad (27.2)$$

Якщо фронт хвилі плоский, тобто  $a \rightarrow \infty$ , радіус  $m$ - тої зони Френеля

$$r_m = \sqrt{mb\lambda} \quad (27.3)$$

Амплітуда світла  $A_m$  залежить від площі зони, від відстані  $b_m$ , від кута посилення променів в досліджувану точку. Можна довести, що при малих номерах зон  $m$  площа зон Френеля приблизно однакова і не залежить від номера. За цих умов кут посилення променів приблизно дорівнює нулю, тому амплітуди світла, що приходить від зон, як це більш ретельно довів Френель, залежать тільки від відстані  $b_m$  і зменшуються за лінійним законом, як члени арифметичної прогресії. Якщо кількість зон Френеля велика  $N \rightarrow \infty$ , то  $A_N \rightarrow 0$ . Скориставшись законами арифметичної прогресії співвідношення

(27.1) можна записати так:  $A = \frac{A_1}{2} + \left( \frac{A_1}{2} - A_2 + \frac{A_3}{2} \right) +$

$+ \left( \frac{A_3}{2} - A_4 + \frac{A_5}{2} \right) + \dots + (-1)^{N+1} \frac{A_N}{2}$ . Тобто, тому що напівсума крайніх членів

прогресії дорівнює середньому члену прогресії, маємо:

$$A = \frac{A_1}{2} + (-1)^{N+1} \frac{A_N}{2}. \quad (27.4)$$

Якщо  $N$  - парне маємо погашення променів і мінімум інтерференції, а якщо непарне, то маємо максимум і підсилення світла.

Якщо закрити всі парні (або непарні) зони, одержимо так звану зонну пластинку, яка дає підсилення світла [див. формулу (27.1)]. Вся відкрита хвильова поверхня діє як половина першої зони Френеля. Такий висновок слідує з формули (27.3), якщо врахувати, що вся відкрита хвильова поверхня налічує безліч зон Френеля і для зони з номером  $N \rightarrow \infty$  амплітуда  $A_N \rightarrow 0$ . Досвід підтверджує отримані результати, що свідчить на користь застосування методу для розрахунку картини дифракції.

Той факт, що вся відкрита хвильова поверхня дає такий саме результат, як половина першої не перекритої зони Френеля *пояснює прямолінійність розповсюдження світла*.

Маючи результати дослідження за методом Френеля можна вияснити **умови спостереження дифракції**. Дифракція спостерігається, якщо кількість зон Френеля в межах оптичної неоднорідності не є великим; її розміри повинні бути співставними з розмірами центральної зони Френеля.

Щоб мати уявлення про ці розміри зробимо розрахунки для радіуса центральної зони [див. формулу (27.2)] в лабораторних умовах, коли  $a \approx b \approx 1\text{ м}$ , а довжина хвилі світла  $0,5\text{ мкм}$ :

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

Якщо відстані великі, то зони значно більші, наприклад на відстані місяця радіус центральної зони Френеля дорівнює приблизно 12 м.

## *2 Дифракція Френеля від круглого отвору в діафрагмі та від круглого екрану. Світле м'ятно Пуассона*

Дифракція, що розглядається в збіжних променях, називається дифракцією Френеля.

*Дифракція Френеля від круглого отвору в діафрагмі.* Використовується точкове джерело світла  $S$ , що знаходиться на відстані  $a$  від поверхні діафрагми з круглим отвором. Картина дифракції розглядається на екрані  $E$  паралельному поверхні діафрагми на відстані  $b$  від неї (рис. 27.3).

Поки екран розташований близько до діафрагми, відстань  $b$  прагне до нуля, зони Френеля малі, їх кількість, що розміщуються в межах отвору велика і світло розповсюджується прямолінійно – зображення отвору на екрані чітке, дифракція відсутня. Збільшуючи відстань  $b$  збільшуємо розміри зон Френеля та зменшуємо їх кількість в межах отвору. На деякій відстані  $b_1$  дифракція стане видимою, а якщо в межах отвору поміститься парне число зон Френеля, в центрі екрану буде спостерігатись темне диференційне м'ятно (позиція екрану  $E_1$  на рис. 27.3). Для точок екрану поза межами осі симетрії

картини зони Френеля будуть відкриті тільки частково, тому дифракційні максимуми будуть змінюватись мінімумами, а потім знову максимумами, як це схематично показано на графіку розподілу інтенсивності дифрагованого світла та дифракційних кілець на екрані  $E_1$ . Віддалення екрану призводить до збільшення розмірів зон і на деякій відстані  $b_2$  кількість зон, що розмістяться в межах отвору, стане непарною і в центрі екрану виникне світле інтерференційне м'ятно, тобто спостерігається інтерференційний максимум. Світле п'ятно зміниться темним дифракційним кільцем і так далі – як це показано на екрані  $E_2$ , що на рис. 27.3. Звичайно, вказані на рис.27.3 відстані не відповідають реальним та розміри дифракційних картин суттєво

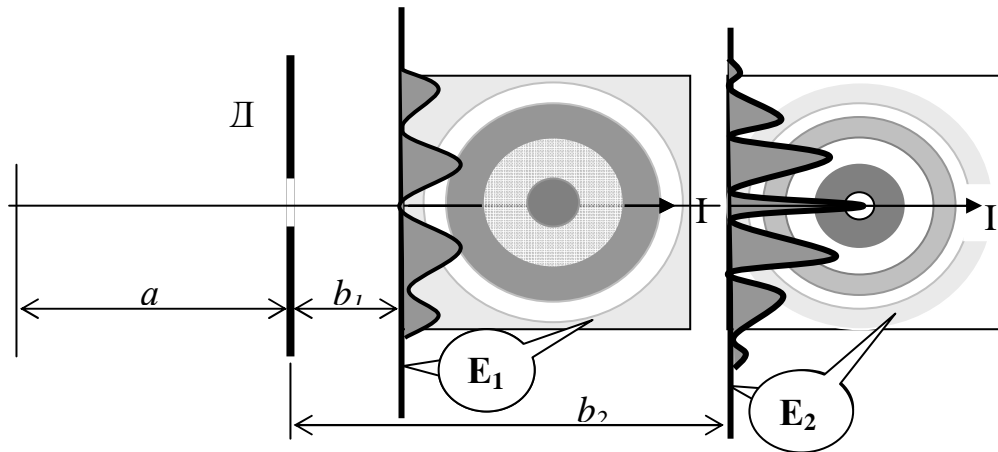


Рисунок 27.3

перебільшені. Щоб мати дифракційну картину для отвору порядку  $1\text{ мм}$ , необхідно мати розміри  $a$  та  $b$  порядку сотень метрів.

*Дифракція Френеля від круглого екрану* (рис. 27.4). Непрозорий круглий екран  $E$  знаходиться на відстані  $a$  від джерела світла  $S$ . Екран спостереження переміщується в напрямку від екрану.

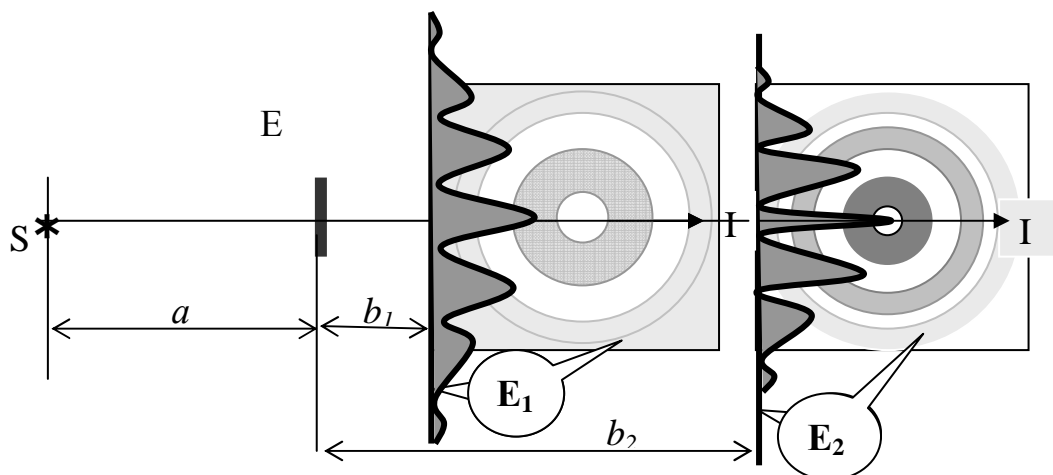


Рисунок 27.4

Поки екран спостереження близько біля досліджуваного екрану  $E$ , в його межах розміщується велика кількість зон Френеля – світло розповсюджується прямолінійно і на екрані спостереження чітка кругла тінь. По мірі віддалення екрану спостереження, коли кількість зон, що розміщуються в межах екрану  $E$  стає не великою, дифракція спостерігається і

в центрі дифракційної картини з'явиться світла пляма – так зване **світле п'ятно Пуассона**. Збільшення віддалі  $b$  призводить до того, світле п'ятно Пуассона, стає чіткішим, залишаючись в центрі дифракційної картини. Виходячи з міркувань симетрії світле п'ятно буде оточеним темним та світлими дифракційними кільцями.

*3 Дифракція Фраунгофера. Роль лінзи в спостереженні дифракційної картини. Таутохронізм оптичних систем. Дифракція від щілини та двох щілин між напівплощинами*

Фраунгофер спостерігав картину дифракції за допомогою зорової труби. Типове розташування приладів при спостереженні дифракції

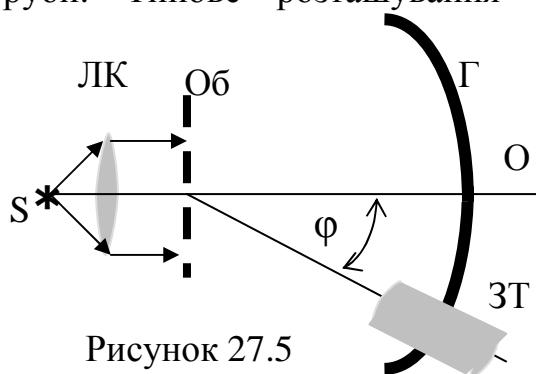


Рисунок 27.5

Фраунгофера наведено на рис. 27.5. Джерело світла  $S$  разом з конденсорною лінзою ЛК створює паралельний потік світла, що розповсюджується повздовж осі коліматора  $SO$ . Інтерференційна картина дифрагованих променів спостерігається за допомогою зорової труби ЗТ, під деяким кутом  $\varphi$ . Труба

переміщуються повздовж лінійки зі шкалою (гоніометр)  $\Gamma$ . Паралельні промені збираються в фокальній площині оптичної системи зорової труби, де дають картину інтерференції. Таким чином, на відміну від дифракції Френеля, дифракція Фраунгофера – це дифракція в паралельних променях.

Розглянемо **дифракцію Фраунгофера від прямолінійної щілини** між двох напівплощин. Типове розташування елементів для спостереження цієї дифракції зображено на рис. 27.6.

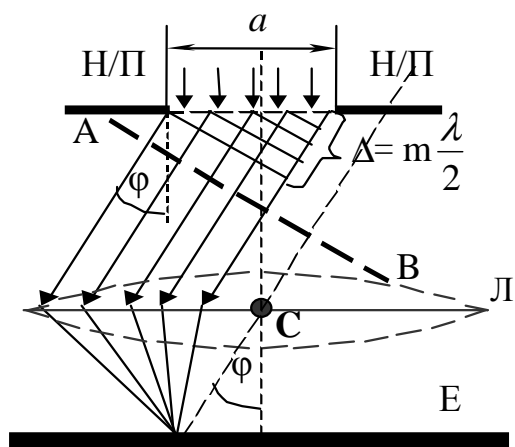


Рисунок 27.6

Спостереження картини дифракції відбувається на екрані  $E$ , що розташований в фокальній площині лінзи  $L$ . За принципом Гюйгенса-Френеля джерелом вторинного випромінювання є поверхня щілини (див. рис. 27.6). Лінза збирає паралельні пучки променів в деяких точках фокальної площини. Наприклад промені, що належать пучку паралельному оптичній осі  $CP$  (див. рис. 27.6), збираються в точці  $P$  екрану  $E$ . Для оптичних систем характерною є властивість збирати плоский фронт (його слід перетину з площиною рисунка є пряма  $AB$  на рис 27.6) в одній точці не вносячи допоміжної оптичної

різниці ходу променів – це так званий **таутохронізм оптичних систем**. Від положення плоского фронту  $AB$  до точки його зображення  $P$  на екрані

промені ідуть однаковий час; по таутохронних шляхах. Оптична різниця ходу променів  $\Delta$  виникає до положення фронту, що належить даному пучку.

Для розрахунку дифракційної картини поверхню щілини розіб'ємо на зони Френеля, відраховуючи відстань від деякої площини паралельної АВ. Відстань до кожної наступної зони збільшується на  $\lambda/2$ , тому загальна кількість зон, що міститься в межах щілини визначиться як  $m = \frac{\Delta}{\lambda/2}$ , де

$\Delta = a \sin \varphi$  (див. рис. 27.6). Якщо  $m = 2k$ , тобто щілина містить парну кількість зон, то під даним кутом маємо мінімум інтерференції дифрагованих променів. Якщо  $m$  непарне і  $m = 2k-1$  – має місце максимум інтерференції дифрагованих променів. Таким чином на екрані матимемо послідовність максимумів і мінімумів інтенсивності світла: за умов, що

$$a \sin \varphi = (2k - 1) \frac{\lambda}{2}; k = 1, 2, 3, \dots, \text{ маємо максимуми} \quad (27.5)$$

і

$$a \sin \varphi = 2k \frac{\lambda}{2} = k\lambda; k = 1, 2, 3, \dots - \text{ мінімуми.} \quad (27.6)$$

Графік розподілу інтенсивності світла  $I$  наведено на рис. 27.7.

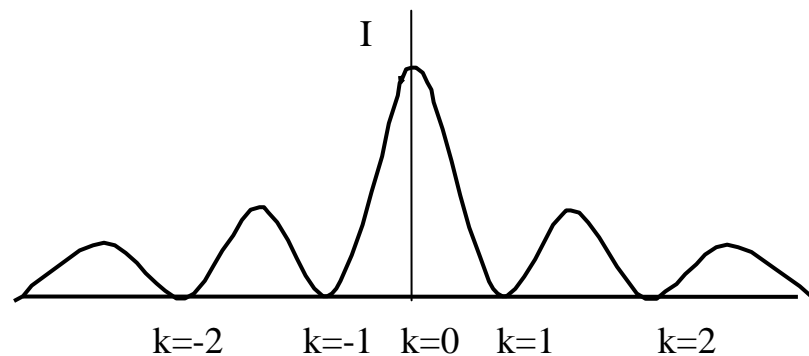


Рисунок 27.7

Якщо розглянути дифракцію Френеля від двох паралельних щілин шириною  $a$ , що розділені між собою проміжком  $b$  (рис. 27.8), то для розрахунку розподілу інтенсивності дифрагованого світла на екрані, можна скористатись з симетрії розповсюджуваних вторинних променів. Дійсно, кожній точці першої щілини знайдеться їй **відповідна точка** на відстані  $a + b$  від неї. Промені, що ідуть від відповідних точок під заданим кутом, називаються **відповідними променями**. Якщо два відповідних променя посилять, наприклад, один одного в досліджуваній точці Р, то і решта відповідних променів також підсиляться в цій точці і дія другої щілини загалом підсилить дію першої. Таким чином для розрахунку картини дифракції досить розрахувати дію двох відповідних променів. Для цього достатньо знати їх *оптичну різницю ходу* і співставити її з умовами максимумів і мінімумів інтерференції [див. формули (1.17)...(1.20)].

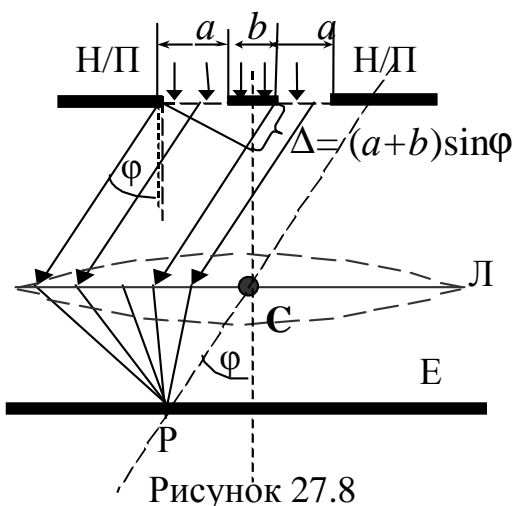


Рисунок 27.8

З рисунка 4.5 видно, що оптична різниця ходу двох відповідних променів (яка відраховується від положення плоского фронту) дорівнює:  $\Delta = (a + b)\sin \varphi$ . Таким чином на екрані виникне інтерференційна картина дифрагованого світла, що відповідає умовам максимумів:

$$(a + b)\sin \varphi = k\lambda \quad (27.7)$$

і мінімумів:

$$(a + b)\sin \varphi = (2k - 1)\frac{\lambda}{2} \quad (27.8)$$

інтенсивності. Картина якісно подібна тій, що зображена на рис. 27.7, але кількісно вона принципово відрізняється від дифракції на одній щілині: умова для максимумів (27.7) відповідає умові мінімумів для дифракції на одній щілині (27.5).

#### 4 Дифракційна ґратка. Формула ґратки. Характеристики дифракційної ґратки як спектрального пристрою

**Дифракційною ґраткою** у вузькому розумінні називають послідовність великої кількості регулярно розташованих щілин (канавок, виступів, подряпин), нанесених тим, чи іншим засобом на плоску (рис. 27.9), або вгнуту поверхню, яка використовується для розкладання світла в спектр. Розміри елементу, що повторюються називаються періодом, або постійною ґратки ( $d$  на рис. 27.9).

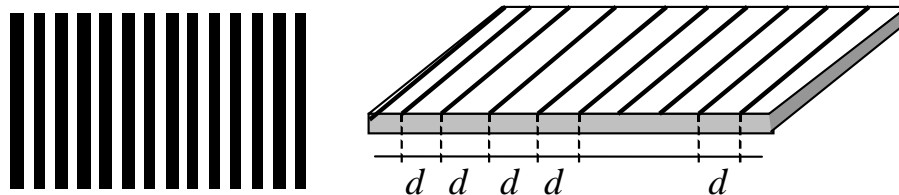


Рисунок 27.9

Якісні ґратки виготовляються шляхом нанесення рисок подряпин за допомогою алмазного інструменту, наприклад на кварцовому склі, кількістю порядку 500 подряпин на 1 мм, тобто **період** такої **ґратки**  $d=1/500\text{мм}=0,002\text{мм}$ . Для менш відповідних цілей використовуються ґратки, що є їх відбитком на спеціальних полімерних пластинках.

В більш широкому розумінні, **дифракційна ґратка** - це регулярна послідовність оптичних неоднорідностей. ґратки можуть бути відбивні і прозорі; лінійні, двомірні, або об'ємні (тримірні).

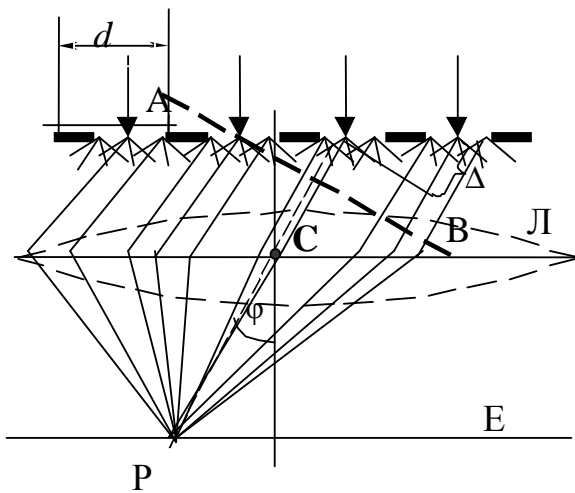


Рисунок 27.10

Познайомимося з теорією найбільш простої плоскої лінійної, або одномірної прозорої ґратки (рис. 27.9 і 27.10), тобто ґратки, що являє собою плоску прозору пластинку, на якій регулярно нанесені паралельні риски-подряпини.

В елементарній теорії виходимо з того, що світло падає перпендикулярно на поверхню ґратки, тобто поверхня ґратки є однією з хвильових поверхонь. Світна поверхня в такому випадку визначається поверхнями щілин ґратки

між рисками (див. рис. 27.10). За принципом Гюйгенса-Френеля кожна точка всіх щілин посилає світло по всіх напрямках (див. рис. 27.10). Дифракційна картина спостерігається на екрані Е, що знаходиться у фокальній площині збиральної лінзи Л. Це є дифракція у паралельних променях, або дифракція Фраунгофера. Як і у випадку двох щілин, картина розподілу інтенсивності розраховується з урахуванням симетрії ходу променів. Положення основних максимумів визначається за формулою (27.8), в якій  $a + b = d$  – тобто це *стала ґратки*. Формула

$$d \sin \varphi = k\lambda \quad k=0, 1, 2, 3, \dots \quad (27.9)$$

називається *формулою дифракційної ґратки*, вона визначає положення основних максимумів інтенсивності світла на екрані спостереження (рис. 27.11). Але, завдяки наявності періодичності через одну, через дві і так далі щілин, поряд з основними появляються допоміжні максимуми і мінімуми інтенсивності.

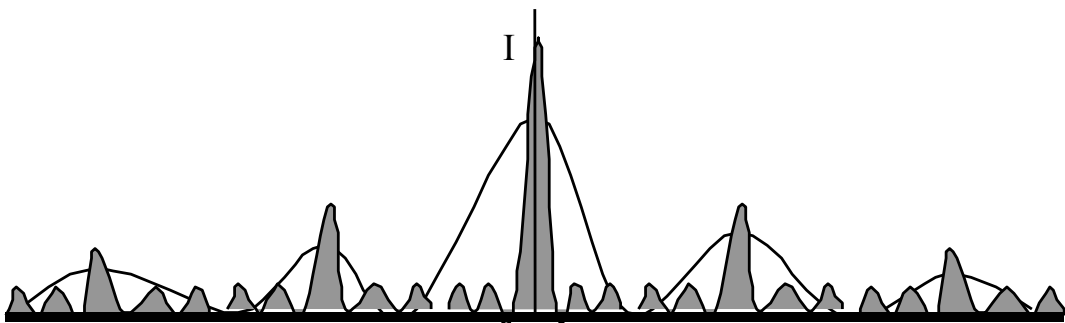


Рисунок 27.11

Як вказує більш детальна теорія для ґратки, що має N щілин, між двома основними максимумами виникає N-1 додаткових мінімумів і відповідна кількість максимумів (див. рис. 27.11). Інтенсивність I додаткових максимумів значно менша за інтенсивність основних максимумів і роль їх зводиться до того, що вони роблять основні максимуми більш вузькими, більш гострими.

З формули ґратки (27.9) видно, що у випадку освітлення ґратки білим і взагалі складним світлом, для кожної довжини хвилі  $\lambda_k$  існують свої кути  $\varphi_k$  (див. рис. 27.10), під якими спостерігаються інтерференційні максимуми. Тобто складне світло, що проходить через ґратку і дифрагує, збирається паралельними пучками в відповідних точках лінзи Л, а якщо для даної точки виконується умова формули екрані Е за допомогою ґратки (27.11), то в ній спостерігається максимум  $k$ -того порядку довжини хвилі  $\lambda$  - світло розкладеться в спектр. На рис 27.12 наведений графік розподілення інтенсивності світла  $I$  на екрані, що відповідає двом довжинам хвиль  $\lambda_1 < \lambda_2$ . Під графіком зображено спектри  $k$ -тих порядків у вигляді прямокутників і під ними позначено червону (чер) і фіолетову (ф) частини спектрів. В центрі спостерігаються максимуми всіх довжин хвиль (див. формулу (27.9);  $k = 0$ ), тому маємо білу смугу.

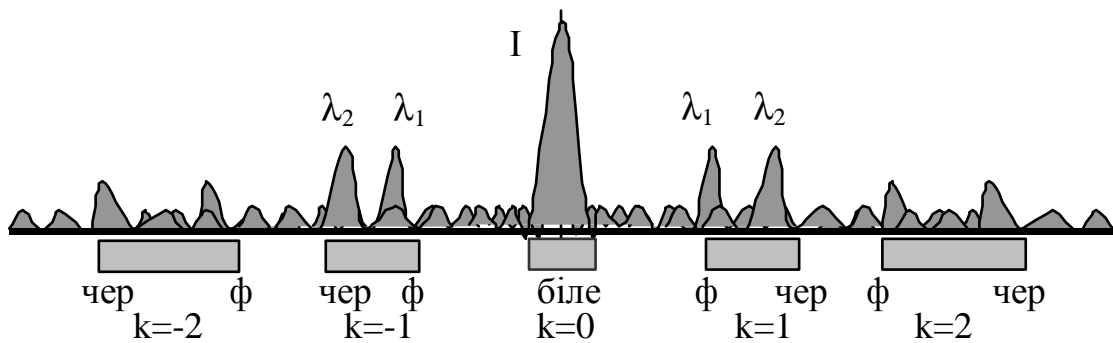


Рисунок 27.12

Завдяки спроможності дифракційної ґратки розкласти складне світло в спектр її використовують як основний елемент спектрографічних приладів. Як спектрографічний прилад дифракційна ґратка характеризується такими величинами як кутова і лінійна дисперсії і роздільна здібність.

Дисперсія характеризує спроможність ґратки просторово розтягувати одиничний інтервал довжин хвиль спектру - кутова на діапазон кутів:

$$D_{\varphi} = \frac{d\varphi}{d\lambda} = \frac{k}{d \cos \varphi}; \quad (27.10)$$

лінійна – на діапазон лінійних розмірів на екрані:

$$D_l = \frac{dl}{d\lambda} = D_{\varphi} F = F \frac{k}{d \cos \varphi}. \quad (27.11)$$

Формули (27.9) і (27.10) є очевидними, якщо виходити з формули ґратки (27.9) і з того факту, що екран знаходиться на фокальній відстані від лінзи (див. рис. 27.10), тобто що  $dl = Fd\varphi$ . Але основною характеристикою спектрографічного приладу є його роздільна здатність:

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{\lambda}{\lambda_2 - \lambda_1}. \quad (27.12)$$

В формулі (27.12)  $\lambda_1$  і  $\lambda_2$  довжини хвиль, які ще видні як окремі спектральні лінії;  $k$  – номер спектру;  $\lambda$  – довжина хвилі, для якої визначається дисперсія (одна із двох, або їх середнє арифметичне);  $N$  – загальна кількість щілин ґратки. За критерієм Релея спектральні лінії розділяються як окремі лінії, якщо спектральний максимум однієї лінії не ближчий від мінімуму іншої (рис. 27.13). На рисунку загальна інтенсивність  $I$  двох ліній зображена пунктирною лінією. Звертає на себе увагу факт, що роздільна здатність ґратки в

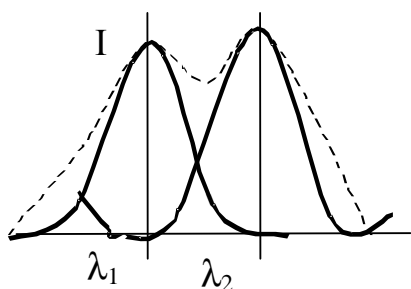


Рисунок 27.13

основному залежить від загальної кількості щілин в ній. Така залежність є зрозумілою, якщо звернутись до рис. 27.11 та до відповідного пояснювального тексту.

### 5 Дифракція рентгенівських променів

Вивчення дифракції на об'ємній дифракційній ґратці для електромагнітного випромінювання світлового діапазону потребує дифракційної ґратки з періодом порядку одного мікрometру. Штучне виготовлення такої об'ємної дифракційної ґратки спряжено з технічними труднощами. Але природа сама приготувала об'ємну ґратку з періодом порядку  $10^{-10}$  м. Такою ґраткою є кристали, але стала такої ґратки співставна з довжиною хвиль рентгенівського діапазону. Хвилі видимого діапазону сприймають кристал як суцільне середовище. Тому дифракція на об'ємній дифракційній ґратці це дифракція рентгенівського випромінювання.

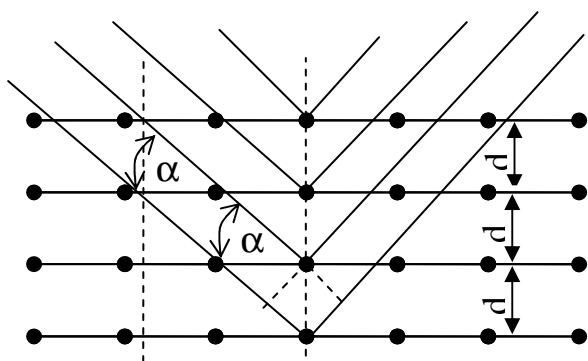


Рисунок 27.14

Характерною особливістю рентгенівського випромінювання є його висока проникність в речовину та відсутність заломлення (показник заломлення для них  $n \cong 1$ ). Розглянемо дифракцію на ідеальному кристалі, в якому атоми розташовані регулярно, створюючи рівновіддалені, на відстанях  $d$ , атомні площини (рис. 27.14).

Вузли кристалічних ґраток стають центрами вторинного когерентного випромінювання. Оптична різниця ходу між променями дифрагованими під такими ж кутами, як і кут ковзання  $\alpha$   $\Delta = 2d \sin \alpha$ . Відповідно дифракційні максимуми спостерігаються за умови:

$$2d \sin \alpha = k\lambda. \quad (27.13)$$

Формула (27.13) відома як закон Вульфа-Брегга, який лежить в основі рентгенографії, тобто напрямку в експериментальних дослідженнях

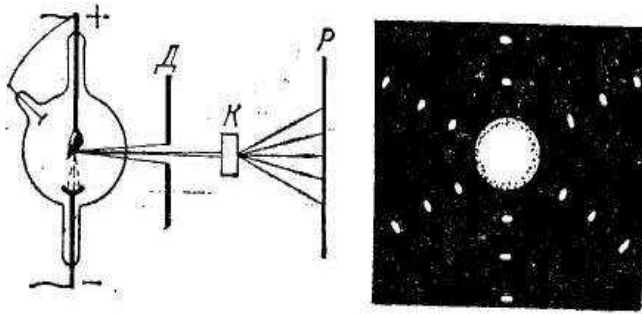


Рисунок 27.15

структури кристалів на підставі вивчення дифракційної картини проходження чи відбивання рентгенівських променів для досліджуваного кристалу. Типова дифракційна картина представлена на рис. 27.14, де вивчався кристал цинкової обманки (ZnS).

## 28 Поляризація світла

- 1 Поляризація хвиль. Види поляризації. Закон Малюса.
- 2 Поляризація світла при проходженні границі розподілу двох прозорих діелектриків. Закон Брюстера. Стовпчик Столетова.
- 3 Поляризація світла в оптично анізотропних середовищах. Подвійне променезаломлення. Призма Ніколя. Дихроїзм. Полярійди.
- 4 Інтерференція поляризованого світла. Кольори тонких кристалічних пластинок.
- 5 Штучна оптична анізотропія. Аналіз пружних деформацій. Ефект Кера.

### 1 Поляризація хвиль. Види поляризації. Закон Малюса

У хвильовому процесі, тобто в процесі розповсюдження коливань, є два характерних напрямки: напрямок коливань і напрямок їх розповсюдження. Якщо ці напрямки співпадають, то хвилі називають *поздовжніми*, а якщо вони є взаємно перпендикулярними, то хвилі - *поперечні*. Оскільки у *поперечних хвилях* є виділеними *напрямок коливань* і *площина коливань* (площина, проведена через напрямок коливань і напрямок розповсюдження), **поперечні хвилі можна поляризувати. Поляризацією називається явище організації коливань у хвильовому процесі.** У реальній поперечній хвилі коливання можуть відбуватись у різноманітних напрямках (перпендикулярних напрямків до напрямку розповсюдження є безліч) і явище поляризації полягає у перетворенні такого неорганізованого хвильового процесу у хвилю з одним напрямком коливань. Хвиля, поляризована таким чином, називається *лінійно-*, або *плоскополяризованою*, а пристрій, що виконує таке перетворення, називається **поляризатором**.

Якщо накладаються два хвильових *плоскополяризованих когерентних* процеси, коливання в яких є *взаємно перпендикулярними*, то результатом додавання таких коливань, як відомо (див. п. 19.3), є еліпс, який в хвильовому процесі зміщується з швидкістю хвилі – виникне **еліптично-поляризована хвиля**. Така хвиля може бути зображена графічно у вигляді

еліптичної спіралі. Звичайно, *основним типом поляризації хвиль є лінійна поляризація.*

Хвильова оптика розглядає світло як електромагнітні поперечні хвилі, як процес розповсюдження коливань *світлового вектора* (див. п. 26.2), тому світло повинно поляризуватись, що і підтверджує досвід. **Поляризація світла**, таким чином, є *процес організації коливань світлового вектора.*

Виходячи з того, що світло, яке посилається Сонцем, розжареними тілами і іншими джерелами є результатом неузгодженого випромінювання безлічі атомів, то напрямки коливань світлового вектора в ньому з рівною вірогідністю представлені у всіх напрямках. Таке світло називається *звичайним*. У *лінійно поляризованому світлі* представлені коливання тільки одного напрямку. Тобто можна сказати, що **поляризація світла полягає також в перетворенні природного світла в поляризоване.**

Графічне зображення звичайного і лінійно поляризованого світла наведено на рис 28.1. Тут зображено неполяризоване звичайне світло -а, б, в і поляризоване -г, д, е, ж. В світлі з поляризацією, зображеною на рис 28.1 е світловий вектор має колючу, а на рис. 28.1 ж гладячу компоненти.

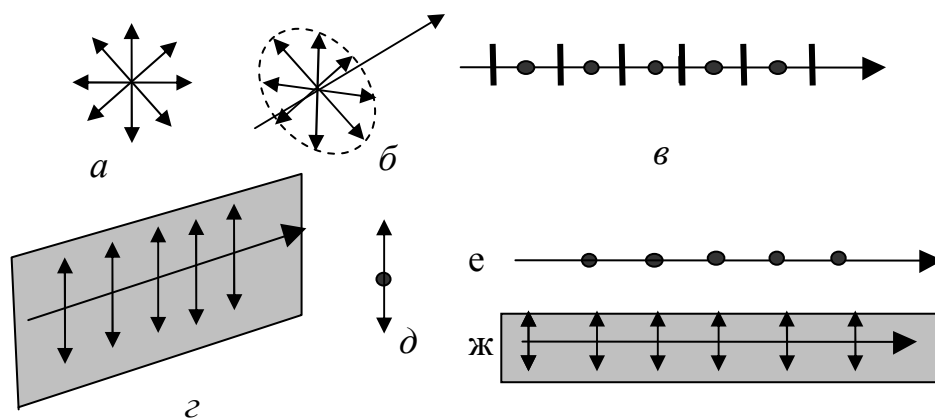


Рисунок 28.1

Як відомо, поляризація, у тому числі і поляризація світла, відбувається за допомогою пристроїв, що носять назву **поляризаторів**. **Поляризатор** пропускає світло з одним напрямком коливань і повністю затримує коливання у перпендикулярному напрямі. Якщо коливання відбуваються у напрямку, що складає кут  $\varphi$  з напрямком пропускання (рис. 28.2), то їх можна розкласти на паралельну  $A_{\parallel} = A \cos \varphi$  і перпендикулярну  $A_{\perp} = A \sin \varphi$  складові. Перші коливання проходить через поляризатор, а другі повністю затримуються ним. Інтенсивність світла пропорційна квадрату амплітуди, тому інтенсивність поляризованого світла, що пройшло через поляризатор, який називається в даному випадку **аналізатором**,

$$I_a \sim (A_{\parallel})^2 = A^2 \cos^2 \varphi \sim I_n \cos^2 \varphi.$$

Співвідношення

$$I_a = I_n \cos^2 \varphi \quad (28.1)$$

називається **законом Малюса**: інтенсивність поляризованого світла, що пройшло через аналізатор, напрямком пропускання якого складає кут  $\varphi$  напрямком коливань світла, дорівнює добутку з інтенсивності світла на квадрат косинуса кута між цими напрямками.

Якщо на поляризатор падає звичайне світло, то в ньому представлені коливання довільних напрямків і  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , тому інтенсивність світла після поляризатора  $I_n = I_0 \langle \cos^2 \varphi \rangle = 1/2 I_0$ , де  $\langle \cos^2 \varphi \rangle = 1/2$  середнє значення квадратів косинусів кутів, а  $I_0$  – інтенсивність звичайного світла до поляризатора. Якщо звичайне світло проходить через систему “поляризатор – аналізатор” (рис. 28.3), то має місце співвідношення:

$$I_a = \frac{1}{2} I_0 \cos^2 \varphi. \quad (28.2)$$

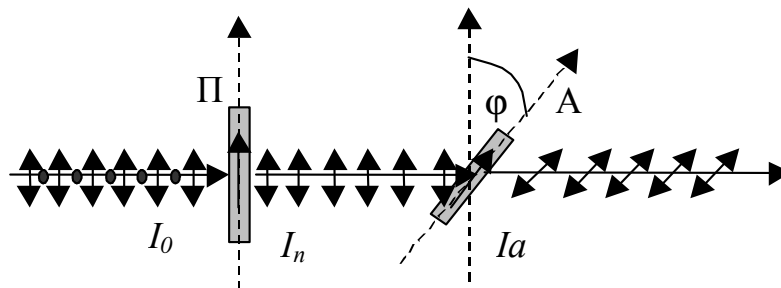


Рисунок 28.3

Співвідношення (28.1) і (28.2) записані для ідеальних поляризаторів. Реально пристрої мають свої коефіцієнти поглинання та відбивання, що накладає свій вплив на згадані співвідношення.

Явище поляризації світла спостерігається при відбиванні від прозорих діелектриків і при проходженні його через прозорі анізотропні кристали, тобто через кристали, оптичні властивості яких залежать від напрямку, у тому числі і напрямку коливань світлового вектора.

## 2 Поляризація світла при проходженні границі розподілу двох прозорих діелектриків. Закон Брюстера. Стовпчик Столетова

Спостерігаючи проходження світла через границю розподілу прозорих діелектриків (вода, скло, лак і таке інше), Брюстер помітив, що відбите і заломлене світло частково поляризовані. **Частково поляризованим** називається світло, в якому представлені коливання різних напрямків, але його інтенсивність залежить від напрямку. Якщо пропустити таке світло через аналізатор, то при повороті аналізатора навколо напрямку розповсюдження інтенсивність світла буде змінюватись від  $I_{max}$  до  $I_{min}$ . Фізична величина

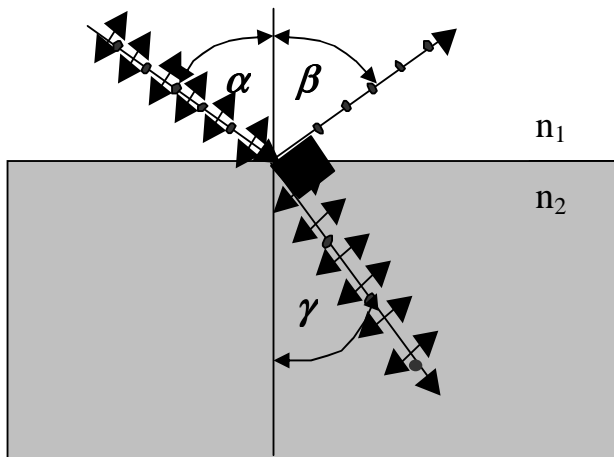


Рисунок 28.4

$$p = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\min} + I_{\min}} \quad (28.3)$$

визначає ступінь поляризації. Брюстер показав, що ступінь поляризації залежить від кута падіння світла і, якщо кут між відбитим і заломленим світлом складає  $90^\circ$ , відбите світло є повністю поляризованим (рис. 28.4). Коливання світлового вектора у ньому відбуваються у напрямку, перпендикулярному до площини падіння світла, а заломлене світло при цьому максимально

поляризоване з перевагою коливань у площині падіння (див. рис. 28.4). При такому куту падіння, який називається кутом Брюстера,  $\gamma = 90^\circ - \beta = 90^\circ - \alpha_B$ , маємо твердження, що носить назву **закону Брюстера**:

$$n_{21} = \frac{\sin \alpha_B}{\sin \gamma} = \frac{\sin \alpha_B}{\cos \alpha_B} = \operatorname{tg} \alpha_B.$$

$$\operatorname{tg} \alpha_B = n_{21} = \frac{n_2}{n_1}, \quad (28.4)$$

де  $n_1$  і  $n_2$  – абсолютні показники заломлення світла першого і другого по ходу променя середовищ (див. рис. 28.4).

Стовпчик з десяти – одинадцяти прозорих скляних пластинок, розташованих під кутом Брюстера до напрямку розповсюдження називається *стовпчиком Столетова*. Світло, що виходить з такої системи, завдяки збільшенню ступеню поляризації на кожній з пластинок, є практично повністю лінійно поляризованим. Стовпчик Столетова використовується в якості поляризатора.

### 3 Поляризація світла в оптично анізотропних середовищах. Подвійне променезаломлення. Призма Ніколя. Дихроїзм. Полярійди

Кристали, оптичні властивості яких залежать від напрямку, у тому числі і напрямку коливань світлового вектора, називаються **оптично анізотропними**. Проходження світла через оптично анізотропні середовища супроводжується явищем **подвійного променезаломлення**. Оптичну анізотропію мають всі прозорі кристали, крім кристалів кубічної симетрії типу кристалів NaCl. Світловий потік, що падає на такий кристал, розділяється в ньому на два потоки. Один з них підкорюється законам геометричної оптики і називається *звичайним*, інший не підкоряється цим законам і називається *незвичайним*. Незвичайні промені не належать площині падіння, їх показник заломлення залежить від напрямку коливань і

змінюється при повороті кристала навколо напрямку падіння світла. В кристалі існує один, або два *напрямки*, в яких *подвійне заломлення відсутнє*. Ці напрямки визначають **головні оптичні осі кристалів**. Відповідно кристали можуть бути *одновісні*, або *двовісні*. В двовісному кристалі обидва світлових потоки незвичайні. Площину, яку визначають падаючий промінь і напрямок головної оптичної осі, поставлений в точку падіння променя, називають **головною оптичною площиною кристала**.

Обидва світлові потоки повністю лінійно-поляризовані у взаємно-перпендикулярних напрямках: незвичайний світловий потік має коливання світлового вектора у головній оптичній площині, а звичайний – у напрямку, перпендикулярному до неї. Ці потоки можуть іти різними або навіть однаковими шляхами, але з різними швидкостями. Якщо один з цих потоків відокремити, то можна одержати лінійно поляризоване світло.

Для виділення одного з світлових потоків та отримання поляризованого світла використовуються штучні прийоми. Наприклад *кристал ісландського шпату* має показники заломлення відповідно для звичайного світлового

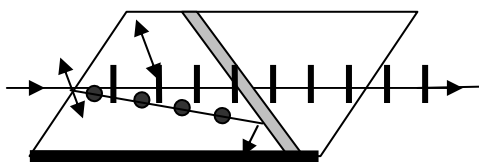


Рисунок 28.5

потіку  $n_o = 1,658$ , незвичайний світловий потік змінює свій показник заломлення  $n_e$  в залежності від напрямку коливань в межах від 1,486 до 1,658. Кристал ісландського шпату розрізають під певним кутом (рис.28.5), а після цього склеюють так званим *канадським бальзамом* з показником заломлення  $n_6 =$

1,550. Канадський бальзам є оптично менш густим середовищем для звичайного потоку ( $n_o > n_6$ ) і оптично більш густим для незвичайного ( $n_e = 1,486 < n_6 = 1,550$ ). Світло направляє на склеєний розріз під такими кутами, що звичайне світло, отримуючи повне внутрішнє відбивання, поглинається затемненою поверхнею кристалу, а незвичайне поляризоване світло виходить з призми. Така поляризуюча призма називається **призмою Ніколя** або просто **ніколь**. Існують і інші поляризуючі призми.

Існують кристали, в яких звичайний світловий потік поглинається значно інтенсивніше ніж незвичайний це **явище дихроїзму**. Кристал, товщина якого складає долі міліметру, повністю поглинає звичайний потік, а на виході маємо світло повністю лінійно поляризоване (що має забарвлення, характерне для даного кристала), тобто виокремлення незвичайного потоку відбувається природно. Явище дихроїзму є характерним для кристалів турмаліну (світло виходить зеленуватого відтінку), йодистого хініну (коричневого), герпатиту (чорний відтінок) і інших. Дрібні кристалики таких речовин напильють з певною орієнтацією оптичних осей на полімерні плівки, які використовуються як поляризатори і називаються **поляроїдами (поляроїдними плівками)**.

#### *4 Інтерференція поляризованого світла. Кольори тонких кристалічних пластинок*

Звичайний та незвичайний світлові потоки некогерентні, тому що були отримані в результаті коливань різних груп атомів. При виході з кристалу ці розділені некогерентні світлові потоки, що накладаються, дають знову неполяризоване світло. Але, якщо на кристал падає поляризоване світло, то обидва світлових потоки будуть когерентними, а на виході з кристала при їх змішуванні одержимо *еліптично-поляризоване світло*. Поляризація такого світла може змінюватись від циркулярної (поляризація по колу) до лінійної (коли еліпс вироджується у пряму лінію), в залежності від товщини шару, пройденого світлом у кристалі, тобто в залежності від зсуву фаз і оптичної різниці ходу променів (див. п. 19.3). Відповідно, кристалічна пластинка з оптичною різницею ходу променів  $\Delta = \lambda/4$  (зсув фаз  $\Delta\varphi = \pi/2$ ) дає *циркулярно поляризоване світло* і носить назву *пластинка у чверть хвилі*. *Пластинка в половину довжини хвилі*, відповідно, має  $\Delta\varphi = \pi$  і  $\Delta = \lambda/2$  і дає *лінійно поляризоване світло з напрямком коливань у  $45^\circ$  до головної оптичної площини*.

Поляризатор (аналізатор), поставлений на шляху такого світла, пропустить коливання двох когерентних світлових потоків з оптичною різницею ходу променів, що залежить від товщини кристалічної пластинки. Коливання будуть відбуватися в одному напрямку, що визначається аналізатором і за ним буде спостерігатися інтерференційна картина, колір якої залежить від оптичної різниці ходу, тобто від товщини пластинки – маємо *кольори тонких пластинок*. Отримана інтерференційна картина може залежати також від оптичних неоднорідностей структури кристалу, в такому випадку розшифрування оптичної картини дасть можливість робити висновки про структурні особливості матеріалу кристалу.

#### *5 Штучна оптична анізотропія. Аналіз пружних деформацій. Ефект Керра.*

Оптична ізотропія матеріалів, що складаються з анізотропних молекул є статистичною і її можна порушити штучно. Наприклад прозорі тверді полімерні матеріали складаються з анізотропних молекул і мають статистичну оптичну ізотропію, тобто світло при проходженні через них не потерпає подвійного променезаломлення. Але при накладанні механічних навантажень, матеріали деформуються, статистична ізотропія матеріалу порушується, він стає оптично анізотропним. При проходженні через такий навантажений матеріал світла воно потерпає подвійне променезаломлення і, якщо його поставити між аналізатором і поляризатором (див. вище п. 5), виникне інтерференційна картина, що підкоряється так званому закону Вертгейма:

$$\Delta = k\lambda = D(\sigma_1 - \sigma_2)d, \quad (28.5)$$

в якому  $\sigma_1 - \sigma_2$  - різниця головних значень напруг, що виникають в площині перпендикулярній до напрямку розповсюдження світла;  $\lambda$  - довжина хвиль використаного світла;  $k$  - кількість інтерференційних смуг;  $D$  - ціна однієї оптичної смуги;  $d$  - товщина матеріалу по ходу променів світла. З аналізу інтерференційної картини за законом (28.5) можна робити висновки про напруження в матеріалі. Наведений ефект використовується для моделювання та вивчення напруженого стану в деталях машин та механізмів, або наприклад, для аналізу розподілу напруг в греблі під дією тиску води.

Оптична анізотропія рідких та газоподібних матеріалів, що складаються з анізотропних молекул, може досягатись створенням в них направлених рухів, течій та інше, або під дією електричних полів. Створенням оптичної анізотропії та вивченням інтерференційної картини займався шотландський фізик Джон Керр. Він дослідно встановив (*ефект Керра*), що для монохроматичного світла даної довжини хвилі  $\lambda$  різниця показників заломлення світла  $n_e - n_o$  пропорційна квадрату напруженості поля  $i$ , відповідно, отримувана різниця ходу променів:

$$\Delta = m\lambda = (n_e - n_o)d = kdE^2, \quad (28.5)$$

де  $E$  напруженість поля перпендикулярна до напрямку розповсюдження світла;  $k$  - постійна Керра;  $d$  - товщина шару рідини. *Ячейки Керра* (рис. 28.6) використовуються в якості швидкодіючих оптичних затворів для зйомок швидкоплинних процесів, в дослідях з визначення швидкості світла в умовах лабораторії. На рис. 28.6  $S$  - джерело світла;  $N_1$  та  $N_2$  - ніколі (див рис. 28.5 та пояснюючий текст), поставлені на не пропускання поляризованого світла;  $K$  - посудина з нітрогліцерином, в якій розміщено конденсатор для створення електричного поля.

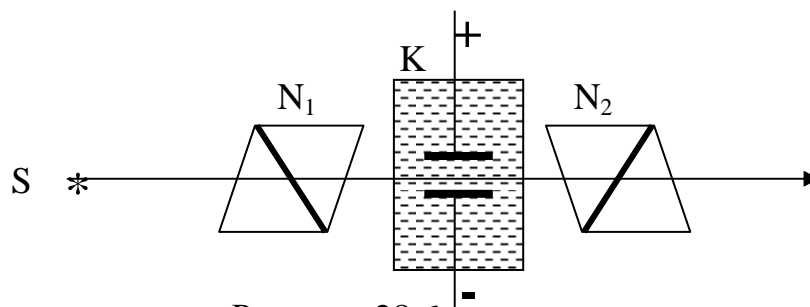


Рисунок 28.6

Той факт, що оптична різниця ходу променів пропорційна квадрату напруженості електричного поля [див. формулу (28.5)] використовується для перетворення, наприклад, коливань напруженості електричного поля звукової частоти, в коливання інтенсивності світла та його запису на кінострічку. Цей ефект використовувався для запису звуку на кінострічку. При відновленні звуку світловий сигнал проходячи записану інформацію, потрапляв на фотоелемент, де знову оптичний запис перетворювався в електричний з послідуочим звуковим відтворенням.

## 29 Теплове випромінювання

1 Види електромагнітного випромінювання. Теплове випромінювання. Рівноважність теплового випромінювання. Характеристики теплового випромінювання та їх взаємозв'язок.

2 Закони теплового випромінювання. Універсальна функція Кірхгофа. Абсолютно чорне та сіре тіла.

3 Елементи теорії теплового випромінювання. Гіпотеза Планка та формула Планка.

4 Поняття про оптичну пірометрію.

1 Види електромагнітного випромінювання. Теплове випромінювання. Рівноважність теплового випромінювання. Характеристики теплового випромінювання та їх взаємозв'язок.

Електромагнітне випромінювання переносить з собою енергію випромінюючого тіла. Для того, щоб випромінювання було стійким в часі втрачена енергія повинна поповнюватись. Вид джерела енергії, за рахунок якого відбувається випромінювання визначає природу електромагнітного випромінювання та за домовленістю дає йому назву.

**Тепловим випромінюванням** називається електромагнітне випромінювання, яке відбувається за рахунок хаотичного, теплового руху молекул речовини. Фізична природа такого процесу полягає в перетворенні енергії теплового руху молекул і атомів речовини в енергію електромагнітного випромінювання. Якщо джерелом енергії випромінювання є інші види енергії, їх прийнято називати **люмінесценціями** (luminis – світло і –escent – суфікс, що означає слабку дію). Конкретний вид люмінесценції залежить від джерела енергії, за рахунок якої воно існує: *електролюмінесценція* - це електромагнітне випромінювання за рахунок енергії електричного поля (свічення газових ламп, наприклад); *біолюмінесценція* - це свічення за рахунок біологічної енергії, наприклад, світлячків; *хемілюмінесценція* – за рахунок хімічної енергії і таке інше.

Особливість теплової енергії полягає в тому, що всі види енергії можуть повністю перетворюватись в теплову, для інших видів це заборонено другим законом термодинаміки - в процесі перетворення частина енергії обов'язково перейде в теплову. Ця особливість призводить до того, що тільки теплове випромінювання є **рівноважним**, тобто між випромінюючим тілом і випромінюванням може встановитись динамічна рівновага. Дійсно, розглянемо деяку адіабатичну евакуйовану дзеркальну порожнину (рис 29.1), в якій є деяке тіло (А на рис. 29.1). Якщо температура тіла вища за абсолютний нуль, воно буде давати теплове випромінювання. В процесі випромінювання тіло губить частину своєї енергії і охолоджується, але випромінювання буде заповнювати собою порожнину, відбиватись стінками і частково потрапляти на тіло, де воно буде поглинатись і поповнювати

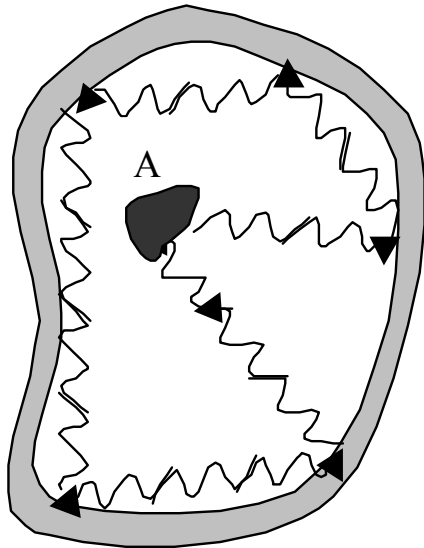


Рисунок 29.1

енергію теплового руху молекул. В решті решт настане динамічна рівновага між енергією, яка випромінюється і поглинається. У випадку рівноваги тілу і випромінюванню приписується однакова температура, тому рівноважне випромінювання називається також **температурним**. Для дослідження рівноважних процесів може бути використаним термодинамічний метод. Основні характеристики досліджуваного процесу, в такому випадку, є енергетичними.

1 **Енергетичний потік  $\Phi$** . Це фізична величина, що визначається потужністю випромінювання з усієї поверхні випромінювача, по всіх напрямках і в усьому діапазоні довжин хвиль.

2 **Енергетична світність, або інтегральна випромінююча здатність**. Це фізична величина, що дорівнює енергетичному потоку з одиниці поверхні випромінювача, це потужність випромінювання з одиниці поверхні у всіх напрямках і в усьому діапазоні довжин хвиль. Тому це інтегральна (за діапазоном випромінювання), але локальна (для даної точки поверхні випромінювача) характеристика:

$$R_e = \frac{W}{St} = \frac{P}{S}, \quad (29.1)$$

якщо випромінювання відбувається рівномірно в часі і з поверхні і

$$R_e = \frac{d^2W}{dSdt} = \frac{dP}{dS}; \quad [R_e] = \frac{Bm}{m^2} \quad (29.2)$$

у загальному випадку.

3 **Спектральна густина енергетичної світності (спектральна випромінююча здатність)**. Це фізична величина, що визначає розподілення енергетичної світності за спектром випромінювання:

$$r_{\lambda,T} = \frac{dR_e}{d\lambda}; \quad r_{\nu,T} = \frac{dR_e}{d\nu}; \quad r_{\omega,T} = \frac{dR_e}{d\omega}, \quad (29.3)$$

де нижні індекси вказують від чого залежить відповідна характеристика. Всі характеристики взаємопов'язані:

$$dR_e = r_{\lambda,T} d\lambda = r_{\nu,T} d\nu = r_{\omega,T} d\omega \Rightarrow R_e = \int_0^\infty r_{\lambda,T} d\lambda = \dots, \quad (29.4)$$

крім цього

$$r_{\nu,T} = r_{\lambda,T} \frac{d\lambda}{d\nu} = \left( \lambda = \frac{c}{\nu} \right) = r_{\lambda,T} \frac{c}{\nu^2} \text{ і так далі.} \quad (29.5)$$

Рівняння (29.5) записано з точністю до знака.

#### 4 Поглинальні здатності: інтегральна

$$A_T = \frac{\Phi'}{\Phi} \quad (29.6)$$

і спектральна

$$a_{\lambda, T} = \frac{d\Phi'_{\lambda}}{d\Phi_{\lambda}}, \quad (29.7)$$

де в чисельнику стоять частини потоку, що поглинаються відповідно в усьому діапазоні довжин хвиль (інтегральна) і у вузькому діапазоні хвиль  $d\lambda$  поблизу хвилі  $\lambda$  (спектральна). В знаменниках - відповідні повні енергетичні потоки. Тобто **поглинальна здатність** – це доля поглинутої енергії.

#### 2 Закони теплового випромінювання. Універсальна функція Кірхгофа. Абсолютно чорне та сіре тіла

Основним законом теплового випромінювання є закон Кірхгофа, який кількісно формулює відоме **правило Прево**: тіла, що не однаково поглинають, по-різному випромінюють. Тобто тіла, які більше поглинають, більше і випромінюють. **Закон Кірхгофа** стверджує, що відношення спектральної густини енергетичної світності тіла до його спектральної поглинальної здатності не залежить від природи тіл:

$$\left( \frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} \right)_2 = \left( \frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} \right)_3 = \dots = f(\lambda, T), \quad (29.8)$$

де  $f(\lambda, T)$  - універсальна функція Кірхгофа. Функція універсальна в розумінні її придатності для всіх тіл і вона може виражатись як  $f(\nu, T)$  або  $f(\omega, T)$  в залежності від використаних характеристик [див. співвідношення (29.3), (29.5)].

Для побудови функції Кірхгофа та для побудови теорії теплового випромінювання вводиться ідеалізація – **абсолютно чорне тіло**, тобто тіло, поглинальна здатність якого дорівнює одиниці:

$$a_{\lambda T}^* = 1. \quad (29.9)$$

Але, як це виходить з закону (29.8), для абсолютно чорного тіла

$$r_{\lambda T}^* \equiv f(\lambda, T), \quad (29.10)$$

тобто спектральна густина енергетичної світності абсолютно чорного тіл співпадає з універсальною функцією Кірхгофа.

Для доведення закону Кірхгофа розглянемо теплоізольовану систему, що складається з двох нескінченно довгих пластин (рис. 29.2), між якими

вакуум і які можуть обмінюватись електромагнітним випромінюванням. Нехай внутрішня поверхня пластини  $a$  абсолютно чорна, а пластина  $b$  – реальне тіло. Через деякий час встановиться теплова рівновага з деякою температурою  $T$ . При цьому чорне тіло віддає з одиниці поверхні енергію

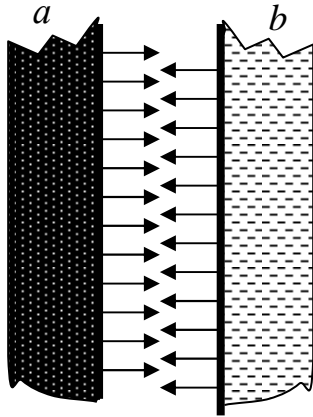


Рисунок 29.2

$dW^* = r_{\lambda T}^* d\lambda$ , а реальне тіло поглинає на одиницю поверхні  $dW = adW^* = ar_{\lambda T}^* d\lambda$ , але щоб відтворилась теплова рівновага, реальне тіло повинно стільки само і випромінювати:

$$dW = r_{\lambda T} d\lambda = a_{\lambda T} r_{\lambda T}^* d\lambda. \quad (29.11)$$

З рівняння (29.11) слідує закон Кірхгофа:

$$\frac{r_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} = r_{\lambda T}^* = f(\lambda, T). \quad (29.12)$$

Введення абсолютно чорного тіла дає можливість побудувати функцію Кірхгофа, якщо мати модель абсолютно чорного тіла і теоретично і експериментально.

**Моделью абсолютно чорного тіла** є порожнє тіло з отвором, що не перевищує однієї десятої його внутрішніх розмірів. Випромінювання абсолютно чорного тіла, яке знаходиться в термостаті зі сталою температурою  $T$ , може бути дослідженим за допомогою спектральних приладів і приладів, що вимірюють потужність випромінювання  $\Delta P$  в діапазоні довжин хвиль  $\Delta\lambda$  поблизу довжини хвилі  $\lambda$ . Таким чином, за відомого значення площі випромінюючої поверхні  $S$  отвору, були обчислені середні значення спектральних густин енергетичних світностей

$$\langle r_{\lambda T}^* \rangle = \frac{\Delta P}{S\Delta\lambda}, \quad \text{та побудована}$$

універсальна функція Кірхгофа, хід якої за різних температур зображено на рис. 29.3.

Хід цієї функції підкоряється наступним законам.

### 1 Закон Стефана-Больцмана.

Енергетична світність абсолютно чорного тіла прямо пропорційна четвертому ступеню абсолютної температури його поверхні:

$$R_e^* = \sigma T^4, \quad (29.13)$$

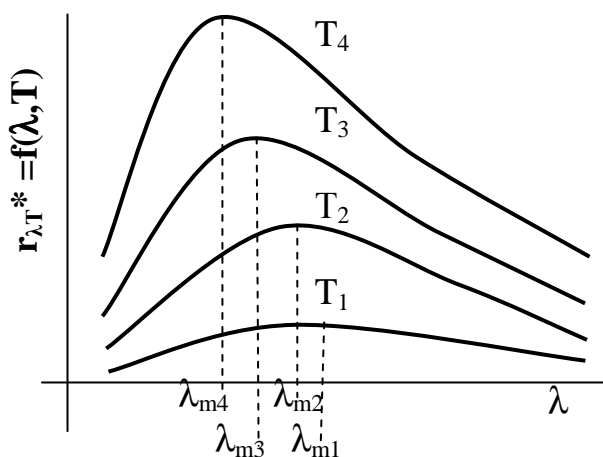


Рисунок 29.3

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

**2 Закон Віна.** Довжина хвилі, на яку припадає максимум спектральної густини енергетичної світності абсолютно чорного тіла, зміщується в бік менших довжин хвиль із збільшенням температури тіла (див. рис. 29.3), а

$$\lambda_m = \frac{b}{T}, \quad (29.14)$$

де  $b = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$  – постійна Віна.

**3 Закон Віна-Голіцина.** Спектральна густина енергетичної світності абсолютно чорного тіла для довжини хвилі, що відповідає максимуму світності, пропорціональна п'ятій степені абсолютної температури випромінюючої поверхні абсолютно чорного тіла:

$$(r_{\lambda T})_{\max} = CT^5, \quad (29.15)$$

де  $C$  – постійна величина.

Закони Стефана-Больцмана і Віна є дійсними тільки для абсолютно чорних тіл. Для реальних тіл вони не виконуються. Були спроби придати закону Стефана-Больцмана більш загальну форму

$$R_e = VT^n, \quad (29.16)$$

де коефіцієнт  $V$  і показник степеня  $n$  повинні бути визначеними експериментально для кожного тіла. Так, для вольфраму з температурою близько  $1000 \text{ К}$ ,

$$R_e = 5,9 \cdot 10^{-13} T^{5,35}. \quad (29.17)$$

Але спостереження за різних температур вказують на те, що ні коефіцієнт  $V$ , ні показник степеня  $n$  не лишаються постійними і за температури близько  $2000 \text{ К}$  для вольфраму  $V = 2,4 \cdot 10^{-11}$ , а  $n = 4,85$ .

*3 Елементи теорії теплового випромінювання. Формула Планка та гіпотеза Планка.*

Для розгляду теорії теплового випромінювання необхідно зробити теоретичні припущення або про будову абсолютно чорного тіла та механізм його випромінювання, або про природу самого рівноважного теплового випромінювання. На підставі таких припущень, якщо вони не протиречиві, будується функція Кірхгофа, яка повинна співпадати з отриманою експериментально (див. рис. 29.3). Крім того, отримані висновки повинні узгоджуватись з відомим **термодинамічним законом Віна.**

В 1893 році німецький фізик Вільгельм Він розглянув *термодинаміку процесу рівноважного стискування рухомим дзеркальним поршнем*

теплового випромінювання в адіабатичній дзеркальній порожнині і отримав для функції Кірхгофа вираз:

$$r_{\lambda T}^* = f(\lambda, T) = \frac{c^4}{\lambda^5} F\left(\frac{c}{\lambda T}\right), \quad (29.18)$$

де  $F\left(\frac{c}{\lambda T}\right)$  - деяка нова функція, в яку добуток  $\lambda T$  входить як одне ціле;  $c$  – швидкість світла в вакуумі. З формули (29.18) впливали всі експериментальні закони теплового випромінювання: (29.13), (29.14) та (29.15).

Висновки, отримані методами термодинаміки, прирівнюються до результатів експериментів за своєю достовірністю, але, тому що ці висновки отримані на загальних підставах, вони не дають конкретних уявлень про природу випромінювання і не можуть дати конкретного виду функції  $F\left(\frac{c}{\lambda T}\right)$ . Для отримання цієї функції необхідні конкретні фізичні припущення або про механізм випромінювання чорного тіла, або про природу самого рівноважного випромінювання.

В. Він моделював абсолютно чорне тіло як систему гармонійних класичних осциляторів, кожен з яких налаштований на деяку частоту  $\nu$  ( $0 < \nu < \infty$ ). Виходячи з класичного розподілу енергії за частотами осциляторів Він отримав закон:

$$r_{\lambda T}^* = f(\lambda, T) = \frac{a_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{a_2}{\lambda T}}}, \quad (29.19)$$

який узгоджувався з термодинамічним законом Віна, давав гарне співпадіння в області малих довжин хвиль (високих частот випромінювання), але в області великих довжин хвиль мав погану відповідність до експериментальних результатів (рис. 29.4) і, крім того, для енергетичної світності давав нескінчено велике значення, що є абсурдом.

Інший підхід запропоновано Дж. Релеєм. Він запропонував розглядати рівноважне теплове випромінювання в порожнині чорного тіла як сукупність стоячих електромагнітних хвиль частотного діапазону від нуля до нескінченості. За законом рівномірного розподілу енергії за ступенями свободи на кожну з пучностей електромагнітного випромінювання приходить енергія  $\varepsilon = kT$ , тобто  $\frac{1}{2}kT$  на електричне поле в пучності та  $\frac{1}{2}kT$  на магнітне поле в тій самій пучності для даної частоти (або довжини хвилі). Учень Релея Джинс провів розрахунки кількості пучностей електромагнітних хвиль на одиничний інтервал довжин хвиль для одиниці об'єму випромінювання і було отримано при цьому на безперечних з точки зору уявлень класичної фізики формулу:

$$r_{\lambda T}^* = \frac{2\pi c^2}{\lambda^4} kT. \quad (29.20)$$

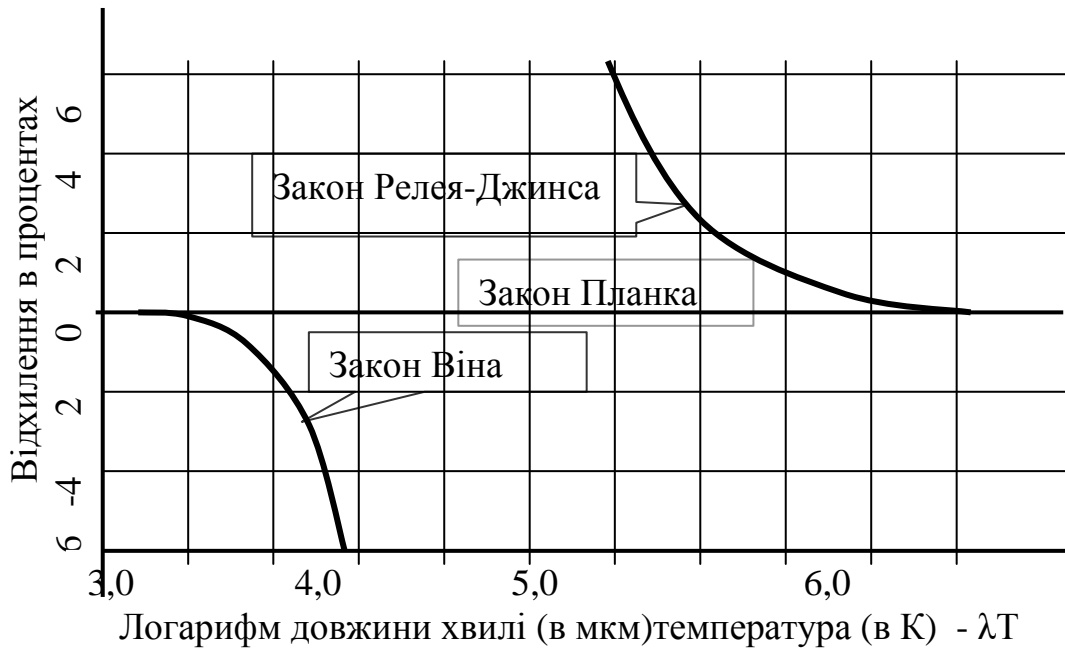


Рисунок 29.4

Формула Релея-Джинса узгоджується з термодинамічним законом Віна

(29.18). Дійсно:  $r_{\lambda T}^* = \frac{2\pi c^2}{\lambda^5} k(\lambda T)$ , але висновки з цього закону абсурдні.

Хоча для великих довжин хвиль співпадіння досить добре з експериментальними результатами (див. рис. 29.4) для коротких довжин хвиль маємо, що чим менша довжина хвилі, тим більша спектральна густина випромінюючої здатності чорного тіла і для  $\lambda \rightarrow 0$   $r_{\lambda T}^* \rightarrow \infty$ . Але практика дає протилежний результат (див. рис. 29.3). Це катастрофічне розходження висновків класичної теорії з практикою отримало назву: «**ультрафіолетова катастрофа**» - катастрофа класичних уявлень. За виразом одного з фізиків «рівняння класичної фізики виявилась не в змозі пояснити, чому погасла піч не випромінює жовтих променів наряду з випромінюванням більших довжин хвиль».

**Формула Планка.** Біля 1900 року знаменитому німецькому фізику Макс Планку вдалося знайти спочатку чисто емпірично формулу, яка добре узгоджувалась з результатами дослідів та в двох граничних випадках переходила відповідно для довгих довжин хвиль у формулу Релея-Джинса (29.20), а для коротких – у формулу Віна (29.19). Формула Планка має вигляд:

$$r_{\lambda T}^* = f(\lambda, T) = \frac{a_1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{a_2}{\lambda T}} - 1}. \quad (29.21)$$

Дійсно, для довгих хвиль, де  $\lambda T \gg 1 \rightarrow e^{\frac{a_2}{\lambda T}} - 1 = 1 + \frac{a_2}{\lambda T} + \frac{1}{2!} \left( \frac{a_2}{\lambda T} \right)^2 + \dots - 1 \approx \frac{a_2}{\lambda T}$  і формула (29.21) переходить в формулу (29.20). Для коротких хвиль, коли  $\lambda T \ll 1$ ,  $e^{\frac{a_2}{\lambda T}} \gg 1$  і одиницею в знаменнику формули Планка можна нехтувати, вона перейде у формулу Віна.

Для того, щоб отримати формулу (29.21), Планк, як і Він припустив, що чорне тіло є сукупність гармонійних осциляторів, для рівноважного випромінювання яких

$$r_{\lambda T}^* = \frac{2\pi c}{\lambda^4} \langle \varepsilon \rangle, \quad (29.22)$$

де  $\langle \varepsilon \rangle$  - середнє значення енергії осциляторів. Дійсно, якщо  $\langle \varepsilon \rangle = kT$ , отримаємо формулу Релея-Джинса і, якщо осцилятори підкоряються класичному розподілу за енергіями, то  $\langle \varepsilon \rangle = e^{-\frac{a_2}{\lambda T}}$ , маємо формулу Віна. Але, для того, щоб виконувався обов'язково термодинамічний закон Віна (29.18) та формула Планка (29.21) середнє значення осцилятора повинно мати вираз:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{cb}{\lambda \left( e^{\frac{cb}{\lambda T}} - 1 \right)}. \quad \text{Для отримання такого середнього значення енергії}$$

осциляторів, **Планк висунув гіпотезу**, що осцилятори повинні мати енергію цілочисельно кратну деякій порції енергії  $\varepsilon_0$ :  $\varepsilon_0, 2\varepsilon_0, 3\varepsilon_0, \dots$ . З аналізу співвідношення для середнього значення енергії осциляторів слідує, що  $\varepsilon_0$  повинно бути пропорційною частоті випромінювання, тобто

$$\varepsilon_0 = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad (29.23)$$

де  $h = 6,64 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – сучасне значення коефіцієнта пропорційності  $b$ , що носить назву **постійної Планка**;  $\nu = \frac{c}{\lambda}$  - частота, на яку налаштований осцилятор;  $\lambda$  – відповідна довжина хвилі випромінювання;  $c$  – швидкість світла у вакуумі.

Таким чином, **гіпотеза Планка стверджує**, що гармонійний осцилятор може мати енергію цілочисельно кратну частоті, на яку він налаштований:

$$W = h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots, Nh\nu \quad (29.24)$$

Відповідно, формула Планка (29.22) приймає вигляд:

$$r_{\lambda T}^* = \frac{2\pi c}{\lambda^4} \frac{hc}{\lambda \left( e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)}, \text{ або в компактній формі:}$$

$$r_{\lambda T}^* = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}. \quad (29.25)$$

Формула Планка (29.25) задовольняє термодинамічному закону Віна, добре узгоджується з результатами експериментів і, природно, з неї випливають всі дослідні закони теплового випромінювання.

Виходячи із зв'язку між енергетичною світністю тіла та його спектральною густиною енергетичної світності (29.4), маємо для абсолютно

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

змінних маємо:

$$R_e^* = \frac{2\pi k^4}{h^3 c^2} T^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} T^4 = \sigma T^4, \quad (29.26)$$

де  $\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15h^3 c^2} = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{Вт}{м^2 K^4}$  - повністю співпадає із значенням постійної в законі Стефана-Больцмана. Таким чином закон Стефана-Больцмана слідує з формули Планка.

Для перевірки можливості отримання закону зміщення Віна (29.14) необхідно знайти похідну від виразу (29.26) та прирівняти її нулю:

$$\left( r_{\lambda T}^* \right)'_{\lambda} = 0; \left( \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \right)'_{\lambda} = 0 \Rightarrow \lambda_m = \frac{b}{T}. \quad (29.27)$$

Гіпотеза Планка про дискретність енергії гармонійного осцилятора зробила революційний переворот в фізиці, послужила основою створення квантової оптики і, в подальшому, сучасної квантової механіки.

### 3 Поняття про оптичну пірометрію

Особливості теплового випромінювання знаходять використання в практиці **оптичної пірометрії**, тобто в принципах будови **оптичних пірометрів** - приладів для вимірювання температури тіл на основі вивчення їх теплового випромінювання. Їх перевага полягає в тому, що для вимірювання температури немає потреби в безпосередньому контакті з

досліджуваним тілом. Можна міряти температуру сталі в плавильній печі або температуру Сонця та інших зірок, температуру спіралі визначається електричної лампи, наприклад.

В залежності від використаної властивості теплового випромінювання оптичні пірометри діляться на **радіаційні, кольоровісні та яскравісні**.

*Принцип дії радіаційних пірометрів* базується на використанні закону Стефана-Больцмана (29.13). Вимірюється загальна потужність випромінювання тіла та розраховується його енергетична світність. Радіаційний пірометр градується за температурою абсолютно чорного тіла. Але випромінювання реального тіла не підкоряється закону Стефана-Больцмана. Вважаючи його сірим, маємо  $R_e = k\sigma T^4 = \sigma T_p^4$  звідки  $T = \frac{T_p}{\sqrt[4]{k}}$ , де  $T$  і  $T_p$  - відповідно істина та виміряна радіаційним пірометром температури;  $k$  – коефіцієнт чорноти тіла.

*Принцип дії кольоровісних пірометрів* базується на використанні закону зміщення Віна (29.14), сенс якого полягає в тому, що із збільшенням температури змінюється колір свічення нагрітого тіла. Тіло, починаючи світитись має червоний колір, який поступово переходить в жовтий, потім тіло дає біле світло, як від Сонця і так далі. Маючи оптичні фільтри певних довжин хвиль, можна знайти довжину хвилі, що відповідає максимуму випромінювання і, за законом Віна розраховується температура, яку б мало чорне тіло з цією довжиною хвилі, що відповідає максимуму свічення – **кольоровісна температура**. Для розрахунку температур реальних тіл використовуються емпірично визначені для кожної речовини поправки.

Практично найбільш вживаним є **яскравісний оптичний пірометр**. Це прилад для безконтактного визначення температури розжарених тіл, *дія якого заснована на співставленні яскравостей еталонного і вимірюваного тіл*. Температуру еталонного тіла градується за випромінюванням абсолютно чорного тіла. Вважається, що при рівних яскравостях температура цих тіл однакова. Але, зважаючи на закон Кірхгофа (29.10), ми бачимо, що це не так. Реальні тіла за даної температури і поглинають і випромінюють менше, ніж абсолютно чорні. Температура  $T_{яс}$ , одержана за допомогою яскравісного пірометра, називається **яскравісною** і вона нижча за істинну температуру реального тіла. Яскравісні пірометри використовуються на практиці для визначення температури розжарених тіл. Наприклад, для визначення температури печей, випромінювання з малих отворів яких близьке до випромінювання чорного тіла, для визначення температури поковок, температури розливної сталі і таке інше. Для різних тіл у майстра є таблиця виправних коефіцієнтів. Для вольфраму в межах температур від 1000 до 2000 К цей коефіцієнт приблизно постійний і дорівнює 1,26, тобто істинна температура тіла  $T = kT_{яс}$ , де  $k = 1,26$  для вольфраму.

Схематичне зображення яскравісного пірометра дано на рис. 29.5. Основною частиною пірометра, таким чином, є еталонна лампа Л з профільованою ниткою розжарення, яка живиться від джерела Дж постійної

напруги (від акумулятора або від мережі через випрямляч). Сила струму

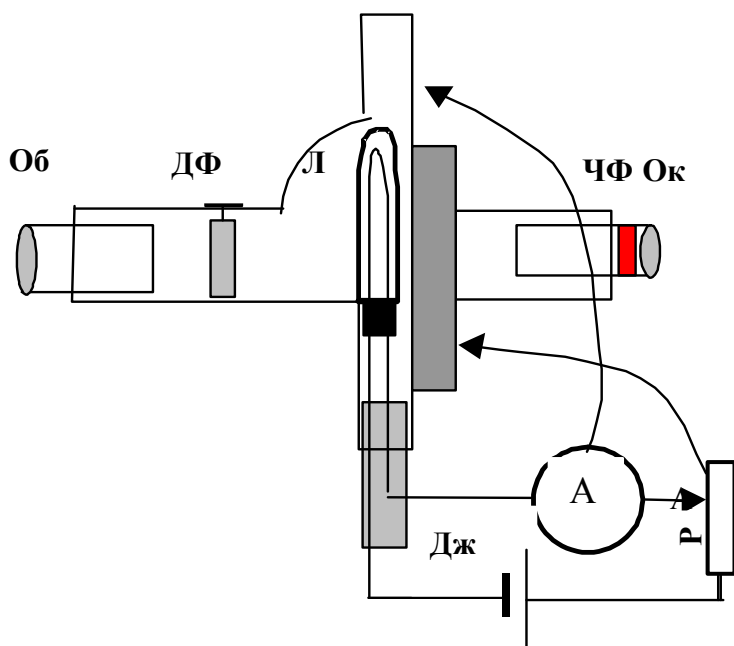


Рисунок 29.5

живлення змінюється за допомогою реостата  $P$  і вимірюється амперметром  $A$ , шкала якого проградуєвана за спектром абсолютно чорного тіла в градусах Цельсія. Реостат і амперметр вмонтовані в прилад. Одержання чіткого зображення спіралі еталонної лампи і поверхні досліджуваного тіла відбувається за допомогою зорової труби, що складається з об'єктива  $Об$  і окуляра  $Ок$ , які вільно переміщуються. В зоровій трубі є два фільтри: червоний

ЧФ для співставлення яскравостей вузького діапазону довжин хвиль і димчастий ДФ, який змінює співвідношення яскравостей і дозволяє, не пережарюючи еталонної лампи, вимірювати більш високі температури тіл. Амперметр має дві шкали: верхню, яка використовується у вимірюваннях без димчастого фільтра (див. рис. 29.5) і нижню, якою користуються, якщо цей фільтр введено.

Крім пірометра ОП-4, можливе використання пірометра такого ж принципу дії, але більш сучасного, типу ЭОП-66, або інших, ще більш сучасних, в яких реєстрація свічення, або навіть співставлення свічення досліджуваного тіла із свіченням чорного тіла відбувається за допомогою об'єктивних методів реєстрування.

### 30 Квантова оптика

- 1 *Загальні відомості з квантової оптики.*
- 2 *Явища фотоелектричного ефекту. Закони фотоефекту.*
- 3 *Ефект Комптона та його теорія.*

#### 1 Загальні відомості з квантової оптики

**Квантова оптика** вивчає явища, обумовлені взаємодією електромагнітного випромінювання з речовиною, в яких проявляється квантова природа світла, тобто *світло веде себе як потік часточок, корпускул, квантів*. Принципова відмінність часток від хвильового процесу полягає в тому, що частка

локалізована в просторі і може передавати свої властивості практично миттєво, а в хвильовому процесі енергія розмита в просторі і в часі.

Розвиток квантової теорії електромагнітного випромінювання почався з роботи М. Планка, що ввів гіпотезу квантування енергії. Для пояснення закономірностей в спектрі теплового випромінювання Планк висунув припущення, що енергія гармонічного лінійного осцилятора може приймати значення, цілочисельно кратні деякій порції енергії  $h\nu$ , *тобто енергія осцилятора  $W=Nh\nu$* , де  $N$  - ціле число;  $\nu$  - частота, на яку налаштований осцилятор;  $h$  - постійна Планка. А. Ейнштейн розглядав теплове випромінювання в стані рівноваги з позицій теорії флуктуацій, тобто відхилень від рівноважного стану. Його теорія, яка була розроблена для ідеальних газів, приводить до результату, що газ, який займає об'єм  $V$ , може

зібратись в його малій частці  $\Delta V \ll V$  з ймовірністю  $\Delta p = \left( \frac{\Delta V}{V} \right)^N$ , де  $N$  -

загальна кількість молекул газу. Примінивши свій метод до рівноважного теплового випромінювання в адіабатично замкненій дзеркальній порожнині і скориставшись гіпотезою Планка, Ейнштейн отримав результат, що електромагнітне випромінювання з загальною енергією  $W$  може зібратись в

малій частці загального об'єму з ймовірністю  $\Delta p = \left( \frac{\Delta V}{V} \right)^{\frac{W}{h\nu}}$ , де  $h\nu$  - квант

енергії за формулою Планка. Співставивши формули для флуктуацій газу і електромагнітного випромінювання, Ейнштейн приходить до висновку, що *електромагнітне випромінювання веде себе подібно до газу*. Він формулює основи квантової теорії. Електромагнітне випромінювання і світло, як окремий випадок, ведуть себе як деякий газ, як сукупність часточок випромінювання. *Світло випромінюється, розповсюджується і поглинається речовиною у вигляді окремих часточок (корпускул), квантів світла, він назвав їх фотонами*. Фотони мають всі властивості корпускули:

вони локалізовані в просторі, мають енергію  $\mathcal{E} = h\nu$ , масу  $m = \frac{h\nu}{c^2}$ ,

імпульс  $p = mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$ ,  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , де  $\nu$  - частота;  $\lambda$  - довжина хвилі

електромагнітного випромінювання;  $h = 2\pi\hbar$  - постійна Планка;  $\vec{k}$  - хвильовий вектор. Фотони існують тільки в русі зі швидкістю світла у вакуумі  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с, їх маса спокою дорівнює нулю. Спроба зупинити фотон призводить до його загибелі з передачею його енергії, маси, імпульсу перешкоді. Енергетична характеристика світла - інтенсивність світлового потоку - визначається як  $I = N h\nu$ , де  $N$  - кількість фотонів, що потрапляють на одиницю поверхні чи в одиницю об'єму.

## 2 Явища фотоелектричного ефекту. Закони фотоелектричного ефекту

**Фотоелектричним ефектом**, або коротко – **фотоелектричним ефектом**, називається одне із фотоелектричних явищ, тобто явищ, обумовлених взаємодією світла з електронами, яке полягає в звільненні фотоелектронів з подальшим їх виходом за межі речовини (*зовнішній фотоелектричний ефект*) або в одержанні змоги переміщуватись в межах речовини під дією електричного поля (*внутрішній фотоелектричний ефект*). Зовнішній фотоелектричний ефект характерний для металів, а внутрішній – для напівпровідників, де фотоелектрони призводять до збільшення електропровідності напівпровідника. Внутрішній фотоелектричний ефект є основою роботи фоторезисторів, приладів для перетворення світлового сигналу в електричний. Якщо фотоелектричний ефект відбувається на *p-n* переході, переході між напівпровідниками *p*- і *n*-типів, так званому вентильному переході, з односторонньою провідністю, то виникає *фотоЕРС*. Фотоелектрони переміщуються в певному напрямку, створюючи різницю потенціалів – *фотоЕРС*. Це явище називається *вентильним фотоелектричним ефектом*, який використовується для перетворення енергії світла, наприклад Сонця, в енергію електричну. Таке перетворення відбувається в сонячних батареях, які встановлюються на супутниках Землі або на будинках для живлення побутових приладів.

Характерні властивості явища фотоелектричного ефекту найбільш безпосередньо проявляють себе в зовнішньому фотоелектричному ефекті, де фотоелектрони можуть з поверхні металу потрапляти у вакуум для послідовного вивчення їх особливостей. Схематичне зображення експериментальної установки для дослідження явища фотоелектричного ефекту представлена на рис. 30.1 а.

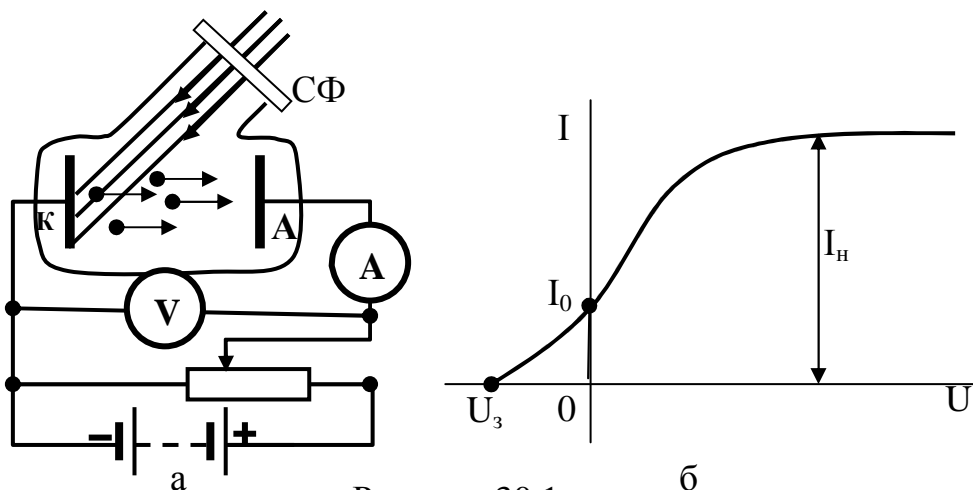


Рисунок 30.1

В скляному балоні, де підтримується вакуум порядку  $10^{-6}$  мм рт. ст., вмонтовані катод К та анод А. Світло потрапляє на фотокатод проходить через світлофільтр СФ, що дає можливість виділити певну частоту  $\nu$  та довжину хвилі  $\lambda$  світла. Різниця потенціалів між анодом та катодом створюється за рахунок джерела енергії. Потенціал анода по відношенню до катода регулюється потенціометром. При цьому є можливість подавати на анод заперний потенціал. Сила фотоструму  $I$  та різниця потенціалів  $U$  між

анодом та катодом реєструються відповідно амперметром А та вольтметром V (див. рис. 30.1 а).

Залежність фотоструму від різниці потенціалів – **вольт-амперна характеристика** пристрою – представлена графіком на рис. 30.1 б. Важливими особливостями вольт-амперної характеристики є наявність поперше **струму насичення**  $I_n$  (див. рис 30.1 б), тобто струму при досягненні якого збільшення різниці потенціалів не призводить до його зростання; по-друге наявність **нульового струму**  $I_0$ , тобто струму, що не дорівнює нулю за нульової різниці потенціалів між анодом та катодом. Для того, щоб струм зрівнявся до нуля, необхідно використати затримуюче електричне поле з різницею потенціалів  $U_3$  - **запірну різницю потенціалів**  $U_3$ , яка носить назву **запірний потенціал**.

Наявність струму насичення є результатом того, що кількість вибитих фотонів з поверхні катоду в одиницю часу за даного випромінювання та даного катоду є певна величина. Тобто *за величиною струму насичення можна зробити висновок про кількість вибитих в одиницю часу фотоелектронів*. При даному світлофільтрі, за даної довжини світла, як показують дослідження, залежність сили струму насичення від освітленості фотокатоду прямо пропорційна (рис. 30.2 а).

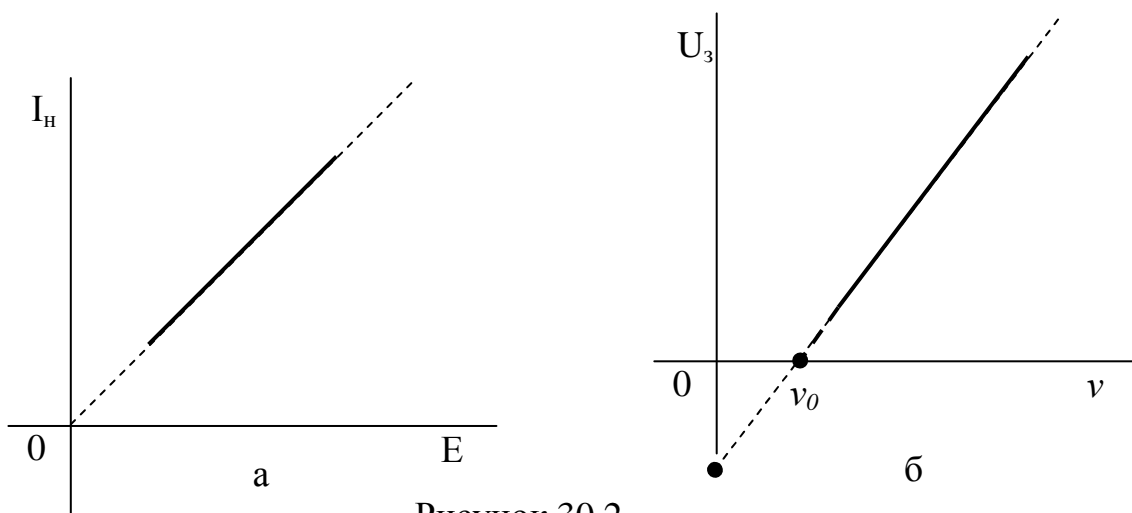


Рисунок 30.2

Наявність нульового струму свідчить про те, що фотоелектрони мають початкову швидкість виходу з катоду та початкову кінетичну енергію. Для того щоб її відібрати від фотоелектронів необхідна робота сил зворотного електричного поля. Причому

$$A_3 = eU_3 = T_{\max} = \frac{mV_{\max}^2}{2}, \quad (30.1)$$

де  $T_{\max} = \frac{mV_{\max}^2}{2}$  - максимальне значення кінетичної енергії фотоелектронів;  $e$  – заряд електронів;  $U_3$  – затримуючий потенціал.

Заміна світлофільтра (частоти випромінювання) призводить до зміни потенціалу запирання, а залежність потенціалу запирання від частоти електромагнітного випромінювання, як показують досліди має лінійну

залежність (див. рис. 30.2 б). Крім того, існує частота  $\nu_0$ , нижче якої, за даної довжини хвилі та даного матеріалу фотокатоду, фотоэффект не відбувається.

Дослідні дані дають можливість сформулювати такі **закони фотоэффекту**.

1 Максимальна енергія і максимальна швидкість фотоелектронів з певного матеріалу для світла даної частоти залежить тільки від освітленості поверхні тіла.

2 Існує така гранична частота  $\nu_0$ , нижче якої фотоэффект не спостерігається. Вона називається *червоною границею фотоэффекту*. Червона границя залежить від хімічної природи речовини і від стану її поверхні.

3 Число фотоелектронів, що виходять за межі поверхні даної речовини, для світла даної частоти залежить тільки від освітленості поверхні і прямо пропорційне їй.

4 Число фотоелектронів із збільшенням частоти світла, за рівних інших умов, збільшується.

Крім названих законів, для фотоэффекту характерним є *безінерційність* – фотоелектрони з'являються не пізніше, ніж через  $10^{-9}$  с після початку освітлення поверхні металу.

Класична хвильова теорія світла не може пояснити таких закономірностей явища фотоэффекту. *Пояснення законів фотоэффекту і самого явища можливо в межах квантової теорії світла* (див. п. 1).

Потік  $N$  фотонів світла з енергіями  $h\nu$ , за заданої інтенсивності  $I$ , створює освітленість поверхні тіла  $E$  за рахунок фотонів, що потрапляють на кожну одиницю площі поверхні тіла. Метал для електронів є потенційною ямою, для вилучення з якої потрібно виконати роботу виходу  $A_{\text{вих}}$ . Є певна вірогідність  $p$  того, що один з цих фотонів передасть свою енергію одному електрону речовини; вірогідність того, що два фотони передадуть енергію одному електрону, або того, що один фотон передасть енергію двом електронам, мала. Величина  $p$  залежить як від природи речовини тіла, так і від енергії фотона. Кожен з електронів, отримавши енергію  $h\nu$ , витратить її частково на виконання роботи виходу  $A_{\text{вих}}$ , решта енергії електрона залишиться у вигляді його кінетичної енергії. Можливі і інші витрати енергії, тому в найкращому випадку, коли названі витрати є єдиними, за законом збереження і перетворення енергії маємо співвідношення, яке відоме під іменем **рівняння Ейнштейна**:

$$h\nu = A_{\text{вих}} + T_{\text{max}} = A_{\text{вих}} + \frac{mV_{\text{max}}^2}{2}. \quad (30.2)$$

Такі уявлення дають повне пояснення законів і закономірностей явища фотоэффекту. Дійсно, акт взаємодії фотона з електроном є практично миттєвим, що пояснює безінерційність явища. Як видно з рівняння (30.2) енергія і швидкість фотоелектронів для даного матеріалу залежать тільки від частоти. Наявність червоної границі також зрозуміла: фотоэффект можливий тільки за умови, що  $h\nu \geq A_{\text{вих}}$ . Очевидно, що гранична, порогова частота  $\nu_0$ , за якої фотоэффект ще спостерігається, визначається з умови рівності

$$\nu_0 = \frac{A_{\text{вих}}}{h} \quad (30.3)$$

і залежить від тих умов, що і робота виходу електронів з металу, тобто від природи речовини і стану поверхні тіла. Третій закон також зрозумілий. Із збільшенням освітленості поверхні тіла збільшується кількість фотонів  $N$ , що за даної вірогідності  $p$  процесу передачі енергії фотона електрону призведе до збільшення числа фотоелектронів  $pN$ . Четвертий закон пояснюється збільшенням вірогідності  $p$  передачі енергії фотоном електрону із збільшенням частоти, а, значить, і енергії фотона.

Рівняння Ейнштейна (30.2) може бути переписаним в різних формах з урахуванням рівностей (30.1) і (30.3), а також того, що  $\nu = \frac{c}{\lambda}$ , де  $c = 3 \cdot 10^8$  м/с – швидкість світла у вакуумі;  $\lambda$  - довжина хвилі світла:

$$h\nu = A_{\text{вих}} + T_{\text{max}} = A_{\text{вих}} + \frac{mV_{\text{max}}^2}{2};$$

$$h\frac{c}{\lambda} = h\nu = A_{\text{вих}} + eU_3 = h\frac{c}{\lambda_0} + eU_3. \quad (30.4)$$

### 3 Ефект Комптона та його теорія

Інше фотоелектронне явище, що знаходить пояснення з позицій квантової механіки та підтверджує наявність імпульсу фотона є *явище збільшення довжини хвилі рентгенівських променів в наслідок їх розсіювання електронами речовини*, відкрите американським фізиком А. Комптоном в 1922 році, яке отримало назву **ефект Комптона**.

Так званий **простий ефект Комптона** полягає в збільшенні довжини хвилі в розсіяних легкими парафінами та графітами рентгенівських променях і підкоряється дослідному закону:

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_k (1 - \cos\varphi), \quad (30.5)$$

де  $\lambda_1$ -довжина падаючих променів;  $\lambda_2$  – довжина розсіяних під кутом  $\varphi$  рентгенівських променів;  $\lambda_k = 2,42 \cdot 10^{-12}$  м – постійна величина, так звана комптонівська довжина хвилі. Схематичне зображення експериментальної установки наведено на рис. 30.3. Електромагнітне випромінювання від

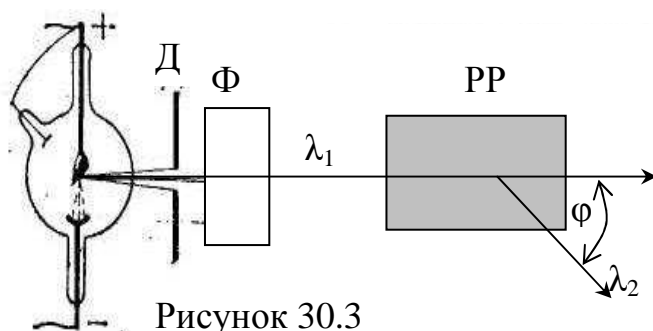


Рисунок 30.3

рентгенівської трубки проходячи через систему діафрагм Д та фільтр Ф вузьким пучком випромінювання певної довжини хвилі  $\lambda_1$  потрапляє на розсіюючу речовину РР (наприклад графіт). Досліджується розсіяне під

кутами  $\varphi$ , де вимірюється довжина хвилі  $\lambda_2$ .

Звертає на себе увагу той факт, що відбувається тільки збільшення довжини хвилі (зменшення частоти), яке не залежить від природи розсіюючої речовини, а визначається тільки кутом розсіювання [див формулу (30.5)]. Класична теорія пояснює розсіювання випромінювання речовиною як вторинне випромінювання заряджених частинок речовини, що виконують вимушені коливання під дією падаючого випромінювання. Але, за положенням класичної теорії, вимушені коливання відбуваються з частотою примушуючої сили. Випромінювання заряджених частинок в результаті їх коливань відбувається також з тією ж частотою. Таким чином нова частота з'явиться не повинна. В класичній теорії є ефект пов'язаний із зміною частоти хвильових процесів при відносних рухах джерела та приймача коливань – це так званий ефект Допплера. Але в ефекті Допплера можливе як зростання так і зменшення частоти. Крім того, це зовсім інший порядок змін частот та зовсім інший закон. Таким чином класична теорія не в змозі пояснити ефект Комптона та обґрунтувати його закон.

Ефект Комптона цілком природно і досить просто пояснюється квантовою теорією електромагнітного випромінювання. Тому що кванти електромагнітного випромінювання в десятки тисяч разів більш енергійні, ніж кванти видимого світла і мають енергію в десятки тисяч разів більшу за енергію зв'язку електронів в парафінах та графітах, можна вважати, що електрон є вільною частинкою. Систему «рентгенівський фотон – електрон», таким чином можна вважати замкненою та консервативною. Тому для неї мають місце закони збереження імпульсу (рис. 30.4) та енергії:

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_2 + \vec{p}_e; \quad \hbar\vec{k}_1 = \hbar\vec{k}_2 + m\vec{V};$$

$$\hbar\omega_1 + m_0c^2 = \hbar\omega_2 + mc^2, \quad (30.6)$$

де  $\vec{p}_i = \hbar\vec{k}_i$ ;  $p_i = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_i} = \frac{h}{\lambda_i}$  - імпульси падаючого та розсіяного фотонів

( $i=1, 2$ ) та їх модулі;  $m\vec{V}$  - імпульс електрона віддачі (див. рис. 30.4);

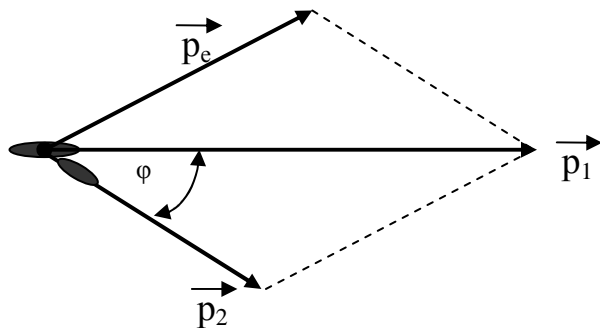


Рисунок 30.4

$\hbar\omega_1 = \frac{hc}{\lambda_1}$  - енергія падаючого

фотона;  $\hbar\omega_2 = \frac{hc}{\lambda_2}$  - енергія

розсіяного фотона;  $m_0c^2$  - енергія

спкою електрона;  $mc^2$  - енергія електрона віддачі – електрон після

зіткнення з енергійним фотоном стає релятивістською частинкою.

Для розв'язку системи рівнянь (30.5) необхідно векторні рівності замінити скалярними, наприклад скориставшись теоремою косинусів:

$$(mV)^2 = \left(\frac{h}{\lambda_1}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda_2}\right)^2 - 2\frac{h^2}{\lambda_1\lambda_2}\cos\varphi. \quad (30.7)$$

Відповідно перепишемо закон збереження енергії:

$$mc = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2} + m_0 c^2 \quad \text{і, після скорочення на } c,$$

піднесемо обидві частини до квадрату:

$$(mc)^2 = \left(\frac{h}{\lambda_1}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda_2}\right)^2 + (m_0 c)^2 - \frac{2h^2}{\lambda_1\lambda_2} + \frac{2h^2 m_0 c}{\lambda_1} - \frac{2h^2 m_0 c}{\lambda_2}. \quad (30.8)$$

Віднімемо від рівності (30.8) співвідношення для імпульсів і отримаємо:

$$(mc)^2 - (mV)^2 = (m_0 c)^2 - \frac{2h^2}{\lambda_1\lambda_2}(1 - \cos\varphi) + 2h^2 m_0 c \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right). \quad (30.9)$$

Скористаємося виразом для релятивістського виразу для маси:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2}}, \quad \text{з якого після перетворення випливає, що}$$

$(mc)^2 - (mV)^2 = (m_0 c)^2$  і таким чином маємо з рівності (30.7) такий результат:

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_0 c}(1 - \cos\varphi), \quad (30.10)$$

в якому  $\frac{h}{m_0 c} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8} = 2,43 \cdot 10^{-12} (\text{м}) = \lambda_k$ . Таким чином квантова теорія не тільки пояснює причини ефекту Комптона і дає його кількісний опис, а також розкриває фізичний зміст комптонівської довжини хвилі, виражаючи її через інші світові константи.

## VIII Квантова механіка

### 31 Елементи квантової механіки

- 1 Гіпотеза де Бройля та її дослідне обґрунтування.
- 2 Хвилі де Бройля. Псі-функція та її фізичний зміст.
- 3 Співвідношення невизначеностей Гейзенберга.
- 4 Рівняння Шредінгера. Стаціонарне рівняння Шредінгера та стандартні вимоги до  $\psi$ -функції.

#### 1 Гіпотеза де Бройля та її дослідне обґрунтування

Встановлення подвійної природи електромагнітного випромінювання навело французького вченого Луї де Бройля в 1914 році на припущення, що і електрон - об'єкт, який вважається частинкою матерії, - також має подвійну природу. Якщо електромагнітному випромінюванню співставляється потік частинок (фототонів), то, навпаки, потоку частинок – електронів можна співставити деякий хвильовий процес. Причому зв'язок між хвильовими та корпускулярними властивостями залишається той саме [див. формулу (30.1)]. Тобто електрону з імпульсом  $\vec{p} = m\vec{V}$  відповідає хвильовий процес з довжиною хвилі

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (31.1)$$

Але висунуте припущення, для того щоб стати теоретичним положенням, потребує експериментального підтвердження. Ідея такого експерименту була висунута А. Ейнштейном. Потік електронів заданої енергії та імпульсу створюється в електронній гарматі, де під дією електричного поля з різницею потенціалів  $U$ , за рахунок роботи сил електричного поля  $A=eU$  збільшується кінетична енергія електронів:  $eU = \frac{p^2}{2m}$ . Тобто електрону набувають імпульсу  $p = \sqrt{2meU}$  і, відповідно до гіпотези де Бройля їм відповідає хвильовий процес з довжиною хвилі  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me}} \cdot \frac{1}{\sqrt{U}} = \frac{1,225 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{U}}$  (м). Якщо різниця потенціалів порядку сотень вольт, то відповідна довжина хвилі порядку  $10^{-10}$  м, тобто це відповідає рентгенівському діапазону електромагнітного випромінювання. Якщо хвильові властивості дійсно присутні такому потоку електронів, то повинна спостерігатись дифракція на просторовій ґратці яка підкоряється максимумам за законом Вульфа-Брегга [див. п. 27.5 та формулу(27.15)]:

$$2d \sin \varphi = k\lambda = k \frac{1,225 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{U}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (31.2)$$

де  $d$  – постійна вибраного кристалу,  $\varphi$ - кут, який створює потік електронів з поверхню кристалу.

Дослід був виконаний К. Девіссоном та Л. Джермером в 1927 році.

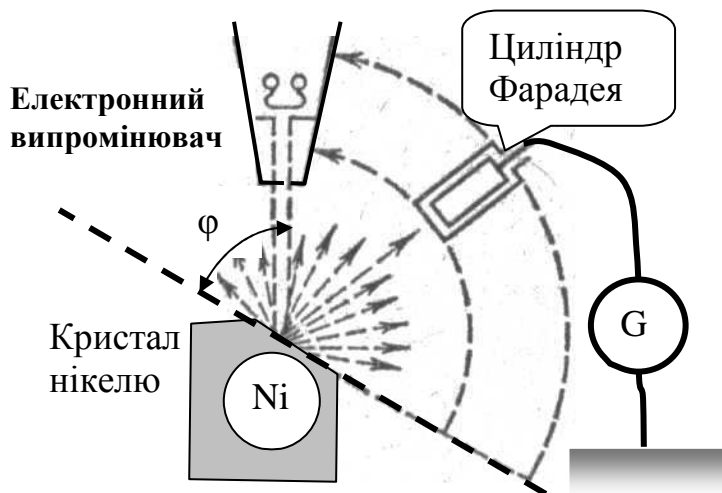


Рисунок 31.1

Схематичне зображення експериментальної установки представлено на рис. 31.34. Потік електронів формується електронною гарматою і потрапляє на кристал нікелю під кутом ковзання  $\varphi$ . Після взаємодії з кристалом електрони потрапляють до циліндру Фарадея і, йдучи через провідник до заземлення, в гальванометрі  $G$  створюють електричний струм. Відповідно до

формули (31.2) можна очікувати періодичність в залежності сили струму від різниці потенціалів (від  $\sqrt{U}$  точніше). Якщо гіпотеза де Бройля не знаходить підтвердження, то графік залежності сили струму від наруги повинна мати форму ймовірносної плавної кривої. Результати досліджень представлені на рис. 31.2, де дуже виразно видна періодична залежність сили струму від

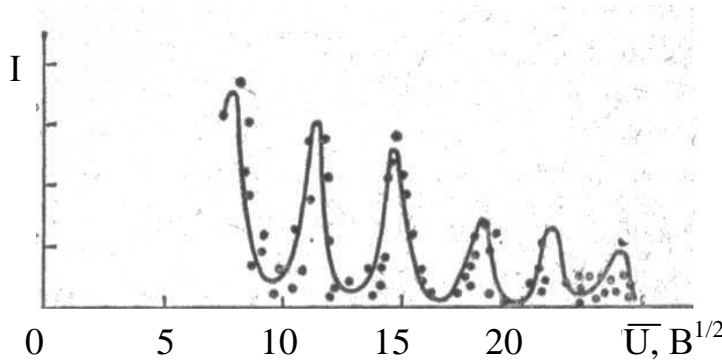


Рисунок 31.2

різниці потенціалів у відповідності до формули як Вульфа-Брегга (31.2), так і формули де Бройля, яка покладена в основу проведеного досліді і формули (31.2). Таким чином проведені досліді безперечно підтвердили гіпотезу де Бройля.

Пізніше досліді з дослідження хвильових властивостей електронів були проведені П. С. Тартаковським в Ленінградському університеті та, незалежно від нього, Г. Том соном. Досліді полягали в дослідженні проходження електронних пучків крізь тонкі плівки полікристалічних структур. За своєю постановкою досліді були аналогічними дослідам з дифракції рентгенівських променів. Результати представлені на рис. 31.3 для рентгенівських променів на пластинці алюмінію (зліва) та пучка електронів, що пройшли крізь плівки

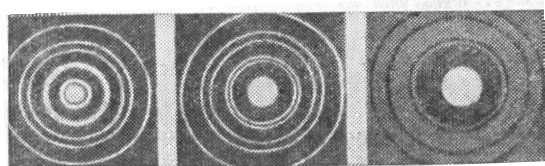


Рисунок 31.3

постановкою досліді були аналогічними дослідам з дифракції рентгенівських променів. Результати представлені на рис. 31.3 для рентгенівських променів на пластинці алюмінію (зліва) та пучка електронів, що пройшли крізь плівки

золота та міді. Користуючись подібними фотографіями, Г. Томсон, користуючись формулою де Бройля (31.1) зробив розрахунки періоду кристалічних ґраток досліджених металів. Результати повністю співпали з результатами рентгеноструктурного аналізу.

Таким чином гіпотеза де Бройля була підтверджена експериментально і стала теоретичним положенням. Але виникає питання: хвильові властивості електронів – це колективна властивість пучка, чи кожна частинка має такі хвильові властивості. В 1949 році радянські вчені Л. М. Біberman, Н. С. Сушкін і В. А. Фабрикант провели дослід з дослідження хвильових властивостей електронів, аналогічний дослід Тартаковського-Томсона, але з тією відмінністю, що електрони по чергово проходили через пластинку, час проходження через пластинку був значно меншим ніж час слідування один за одним. Коли час експозиції картини був достатньо великим, отримана дифракційна картина нічим не відрізнялась від тієї, що представлена на рис. 31.3. Важливо відмітити, що кожен електрон потрапляв в якусь точку екрану, як окрема частинка, але він потрапляв в ті частини екрану, яка підкорялась хвильовому закону дифракції для відповідного хвильового процесу.

Таким чином, гіпотеза де Бройля про дуалістичний характер електронів підтверджена, більше того, доведено, що дуалістичні, корпускулярно хвильові властивості належать кожній окремій частинці. На сучасному етапі розвитку науки, такі властивості мікрооб'єктів не визивають сумнівів, замість рентгенографії в дослідження структури кристалів використовується електроннографія, протонно- та нейтроннографія. Хвильові властивості електронів використовуються в електронних мікроскопах.

Хвильові властивості проявляються на рівні елементарних часток та для атомів і, навіть для молекул. Але макроскопічні частинки, наприклад пилінка розміром  $10^{-6}$  м та масою  $10^{-6}$  г, що рухається із швидкістю 1 мм/с, не може проявити свої хвильові властивості тому, що відповідаючи їй

довжина хвилі  $\lambda = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{10^{-9} \cdot 10^{-3}} \approx 7 \cdot 10^{-22}$  (м). Дифракційна ґратка, для того щоб

вона була дифракційною ґраткою для такої пилінки, повинна мати період порядку  $10^{-20}$  м, що незрівнянно менше за розміри частинки – вона не пройде через таку ґратку. Тому корпускулярно-хвильовий дуалізм властивий тільки об'єктам мікросвіту. А дослідження руху мікрооб'єктів потребує створення нової механіки, заснованої на хвильових уявленнях про природу часток. Така теорія створена, вона має назву **квантова механіка**.

## 2 Хвилі де Бройля. Псі-функція та її фізичний зміст

В квантовій механіці мікрооб'єкту з імпульсом  $\vec{p} = m\vec{v}$  і енергією  $E = h\nu$  співставляється деякий хвильовий процес  $\Psi$ ,  $\Psi$ -функція з частотою

$\nu = \frac{E}{h}$ ;  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  і довжиною хвилі  $\lambda = \frac{h}{p}$  та хвильовим вектором  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ .

Наведеним співвідношенням між хвильовими та корпускулярними властивостями мікрочасток, разом з формулою (31.1) відомою як формула де Бройля, у випадку вільного електрона а плоска гармонійна хвиля

$$\Psi = A_0 e^{-i(\alpha t - \vec{k} \cdot \vec{r} + \alpha)} = A_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r} + \alpha)}, \quad (31.3)$$

що відповідає вільному електрону з цим імпульсом  $\vec{p}$  і енергією  $E$  та відповідними їм довжиною хвилі  $\lambda$ , хвильовим вектором  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  і частотою,  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ , називають *хвилею де Бройля* або просто  *$\Psi$ -функцією*.

Дифракційна картина перерозподілу інтенсивності засвітлювання екрану від електронів, які пройшли, наприклад, через щілину або інший отвір діафрагми, з точки зору хвильового процесу пропорційна  $I \approx \psi^2$ . Але ж інтенсивність засвітлювання екрана під дією потрапивших на нього електронів пропорційна їх числу:  $I \approx \frac{\Delta N}{N \Delta V}$ , де  $\Delta V$  – елемент об'єму, в який вони потрапили  $\frac{\Delta N}{N \Delta V} = \frac{\Delta \rho}{\Delta V} = \rho(x, y, z, t)$ , є густина ймовірності знаходитись в заданій точці з координатами  $x, y, z$  в даний момент часу  $t$  для електрона або іншого мікрооб'єкта. Таким чином *фізичний зміст хвиль де Бройля* полягає в тому, що квадрат їх модуля (в загальному випадку хвиля де Бройля виражається комплексною функцією),

$$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^* = \rho(x, y, z, t), \quad (31.4)$$

визначає густину ймовірності мікрооб'єкта знаходитись в даній точці простору для заданого моменту часу. Реальний процес, який зображав би хвилі де Бройля, на даному етапі розвитку науки не відомий, тому ці хвилі вважаємо як *хвилі ймовірності*.

### 3 Співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Подвійна природа квантових об'єктів призводить до того, що для їх визначення ми не можемо скористатись ні характеристиками матеріальних точок (координата, імпульс, енергія), ні характеристиками Гармонійних хвиль (частота, довжина хвилі). На використання тих і інших характеристик накладаються певні обмеження. Динамічні характеристики матеріальної точки використовуються з обмеженнями, які відомі як *співвідношення невизначеностей Гейзенберга*. Дві канонічно спряжені динамічні характеристики (тобто такі, що входять одночасно в канонічні рівняння механіки Гамільтона) не можуть бути відомі абсолютно точно одночасно, їх невизначеності зв'язані такими співвідношеннями:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar; \Delta y \Delta p_y \geq \hbar; \Delta z \Delta p_z \geq \hbar; \Delta E \Delta t \geq \hbar, \quad (31.5)$$

де розглянуті невизначеності координат і невизначеності проєкцій імпульсів на відповідні осі, а також невизначеність значення енергії частки і час її існування в стані з даною  $\Psi$ -функцією.

Гармонійною хвилею також неможливо в загальному випадку зобразити квантову частку тому що фазова швидкість хвилі відрізняється від швидкості руху частки:  $V_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} = \frac{mV^2}{2mV} = \frac{V}{2} \neq V$ . Її можна зобразити

деякою групою хвиль з частотним набором  $\omega \pm \frac{\Delta\omega}{2}$ , якщо

$\Delta\omega\Delta t \geq 2\pi$ , де  $\Delta t$  – час існування мікрооб'єкта в даному стані Дійсно

$$V_{gp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\hbar\omega}{d\hbar k} = \frac{dE}{dp} = \frac{d\left(\frac{p^2}{2m}\right)}{dp} = \frac{2p}{2m} = V. \quad \text{Але використання в квантовій}$$

механіці апарату для вивчення поведінки груп хвиль має труднощі, пов'язані з сильною дисперсією хвиль де Бройля: хвильовий пакет швидко розпливається, а частинка може існувати в даному стані досить довго. Тому наука, що вивчає поведінку об'єктів мікросвіту потребує особливої теорії і ця теорія - квантова механіка.

Самі співвідношення невизначеностей (31.5) мають самостійне значення, вони дозволяють проводити оцінку значень тих чи інших параметрів квантових об'єктів. Але для їх визначення, для вивчення поведінки об'єктів мікросвіту необхідно мати закон руху.

*4 Рівняння Шредінгера. Стаціонарне рівняння Шредінгера та стандартні вимоги до  $\psi$ -функції.*

Тому, що рух мікрооб'єктів поріднений з хвильовим рухом, основний закон квантової механіки повинен бути подібним до хвильового рівняння [див. рівняння (23.1)] (а не до рівняння Ньютона, наприклад, для матеріальної точки), яке б включало в себе динамічні характеристики мікрооб'єктів. Такий закон відкрив Е. Шредінгер. Він враховує особливості руху мікрооб'єктів, являється фундаментальним законом, висновки з якого не протирічать досвіду. Цей закон називається **рівнянням Шредінгера**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + [E - U(x, y, z, t)]\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (31.6)$$

це так зване **часове**, або **загальне рівняння Шредінгера**, в якому  $\Delta$  - оператор Лапласа, що являє собою сукупність других похідних за координатами;  $E$  - енергія мікрочастки, а  $U(x, y, z, t)$  – її потенціальна

функція, що визначає особливості силового поля, в якому рухається мікрооб'єкт, тобто конкретизує задачу.

Розв'язавши рівняння Шредінгера, отримаємо конкретну  $\Psi$ -функцію, квадрат модуля якої  $|\Psi|^2 = \rho(x, y, z, t)$ , що дасть можливість вивчити рух досліджуваного тіла.

Завдяки тому, що  $\Psi$ -функція входить до рівняння Шредінгера, а квадрат її модуля має зміст густини ймовірності, величини, що піддається безпосереднім фізичним вимірюванням, на неї накладається ряд обмежень. Ці обмеження носять назву *стандартних умов*:  $\Psi$ -функція повинна бути гладкою, тобто диференційованою разом зі своєю похідною за просторовою координатою, та за часом; однозначною; безперервною, кінцевою і нормованою на одиницю. Виконання цих умов накладає обмеження на можливі значення параметра  $E$ . Для того, щоб  $\Psi$ -функція відповідала стандартним умовам, енергія може приймати тільки такі значення, що створюють *спектр її дозволених значень*.

Є велике коло задач, в яких досліджується стаціонарний рух, тобто рух, що не змінюється з часом. Ознакою такого руху є незалежність потенціальної функції від часу, яка в такому випадку є потенціальною енергією досліджуваного мікрооб'єкта. В стаціонарному русі  $\Psi$ -функція може бути представлена як  $\Psi = \psi e^{-i\omega t}$ , де  $\psi$  - амплітуда ймовірності. Підстановка такого виразу до рівняння Шредінгера дозволяє його значно спростити:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0. \quad (31.7)$$

Рівняння (34.5) є *стаціонарним рівнянням Шредінгера*, придатним для розв'язання тільки *стаціонарних задач*. Стандартні вимоги до  $\psi$ -функції стаціонарного руху такі саме як і до  $\Psi$ -функції загального випадку. Умова нормування ймовірносної  $\psi$ -функції має вигляд:

$$\int_V |\psi|^2 dV = 1 \text{ або, тому що } \psi\text{-функція, як правило,} \\ \text{комплексна, } \int_V \psi \psi^* dV = 1. \quad (31.8)$$

і означає, що можливість знайти частинку в області існування є достеменною подією

### 32 Елементарні задачі квантової механіки

1 Частинка в прямокутному одномірному ящику з нескінченно високими стінками.

2 Квантовий гармонійний осцилятор.

### 3 Поведінка мікрооб'єктів на прямокутному одномірному бар'єрі. Тунельний ефект.

Дослідження елементарних задач квантової механіки переслідує мету знайомства з методами квантової механіки, але, крім того, вони можуть відігравати самостійну роль. Тому, що особливості поведінки квантових об'єктів визначається особливостями силовим фактором, що входить в стаціонарне рівняння Шредінгера через потенціальну енергію, задачі, за домовленістю, формулюються за формою графіку потенціальної енергії досліджуваного об'єкту: поведіння частинки в потенційному ящику, або в потенційній ямі; в параболічній ямі; в гіперболічній ямі; поведіння частинок на прямокутному потенційному бар'єрі і таке інше.

#### 1 Частинка в прямокутному одномірному ящику з нескінченно високими стінками

Розглядається поведінка квантової частинки в одномірному рухові в потенційному полі, залежності потенціальної енергії якого представлена на рис. 32.1 а, з графіком, що має форму прямокутної ящика (ями) шириною  $l$  з нескінченно високими стінками (рис. 32.1 б).

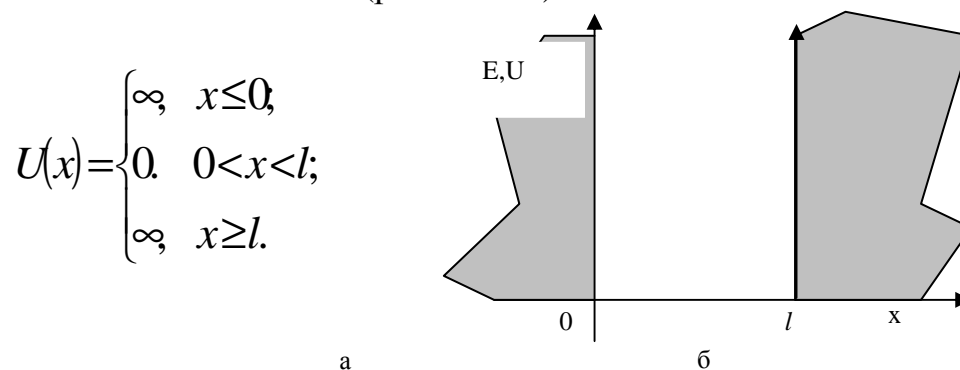


Рисунок 32.1

Тому, що рух одномірний, а потенційне поле не залежить від часу, поведінка квантової частинки описується функцією  $\psi(x)$ , яка підкоряється одномірному стаціонарному рівнянню Шредінгера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0. \quad (32.1)$$

Це лінійне диференціальне рівняння добре відоме як диференціальне рівняння гармонійних коливань. В ньому можна пере позначить

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad (32.2)$$

де  $k$  – дійсне число, тому що всі величини, які його визначають суттєво додатні величини. Для розв'язання диференціального рівняння другого порядку необхідно додати дві граничні або початкові умови та, зважаючи на

імовірнісний характер  $\psi$ -функції, умову її нормування на одиницю. Таким чином, з врахуванням заміни (32.2) маємо:

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

$$\psi(0) = 0; \quad \psi(l) = 0; \quad \int_0^l |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad (32.3)$$

де граничні умови пов'язані з нескінченністю потенціальної енергії за межами ящика та з неперервністю  $\psi$ -функції і означають, що на границях ящика частинка бути також не може.

Розв'язками рівняння (32.3) є гармонійні функції:

$$\psi(x) = \psi = A \sin(kx + \alpha), \quad (32.4)$$

де  $A$  та  $\alpha$  постійні інтегрування, що знаходяться з граничних умов та умови нормування:

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

$$\psi(l) = A \sin kl = 0 \rightarrow kl = n\pi; \quad n = 1, 2, 3, \dots; \quad k = \frac{n\pi}{l}. \quad (32.5)$$

Нормуючий коефіцієнт  $A$  знаходиться з умови:

$$\int_0^l A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{l}}. \quad (32.6)$$

Таким чином для  $\psi$ -функції має місце вираз:

$$\psi(x) = \psi = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (32.7)$$

Квантове число  $n$  визначає номер стану частинки і не може приймати нульове значення тому, що це означало б, що частинка ніде не існує.

Розв'язання рівняння Шредінгера дозволяє визначити фізичний зміст постійної  $k$  [див. співвідношення (32.2) та (32.5)] як хвильового числа для хвилі де Бройля, яка співставляється частинці в розглядуваних умовах.

Квадрат  $\psi$ -функції дає густину ймовірність знаходження частинки в різних точках ящика:  $\rho(x) = \frac{2}{l} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x$ ;  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Графіки  $\psi$ -функцій для різних станів та відповідні графіки розподілення густини ймовірностей  $\rho(x)$  знаходження частинки в різних точках ящика наведені на рис. 32.2.

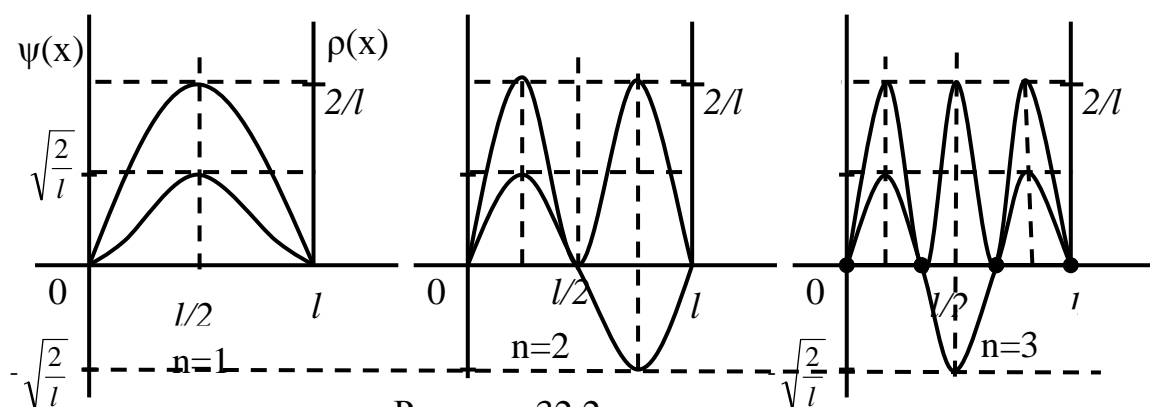


Рисунок 32.2

Звертає на себе увагу той факт, що в непарних станах, коли  $n=2m+1$ , частинка з максимальною ймовірністю знаходиться в точці, що відповідає координаті  $x=l/2$ . У випадку парних значень  $n=2, 4, \dots$  навпаки частинка в цій точці не може знаходитись. Подібні стани спостерігаються для стоячих хвиль коливань струн.

Як на те було вказано при представленні рівняння Шредінгера, розв'язок рівняння дозволяє визначитись з енергією частинки в потенційному ящику. Для цього повернемося до співвідношень (32.2) та (32.5):

$$\frac{2mE}{h^2} = k^2 = n^2 \frac{\pi^2}{l^2} \Rightarrow E_n = n^2 \frac{\pi^2 h^2}{2ml^2}, n=1,2,3,\dots \quad (32.8)$$

Тобто **енергія частинки потенціальному ящику приймає дискретний ряд дозволених значень – квантується.**

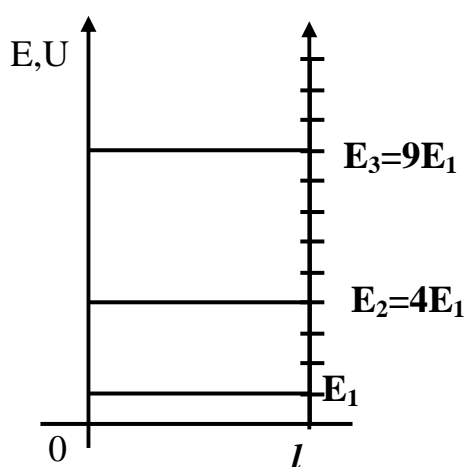


Рисунок 32.3

Відстань між окремими енергетичними рівнями (рис. 32.3)

$$\Delta E_{n+1,n} = E_{n+1} - E_n = (2n+1) \frac{\pi^2 h^2}{2ml^2} \quad (32.9)$$

зростає із збільшенням номеру стану, тобто із зростанням енергії, але відносна відстань

$$\frac{\Delta E_{n+1,n}}{E_n} = \frac{(2n+1)}{n^2}, \quad (32.10)$$

Навпаки, зменшується і, коли  $n \rightarrow \infty$ , тобто коли енергія суттєво зростає, відносна відстань між енергетичними рівнями прагне

до нуля. Відповідно, *квантуванням енергії за великих значень енергій можна нехтувати.* Нехтувати квантуванням енергії слідє також для мікрочасток з великою масою та для потенційних ящиків ширина яких суттєво перевищує атомні розміри ( $\sim 10^{-10}$  м), як це легко підтвердити виходячи з формул (32.8) та (32.9).

## 2 Квантовий гармонійний осцилятор

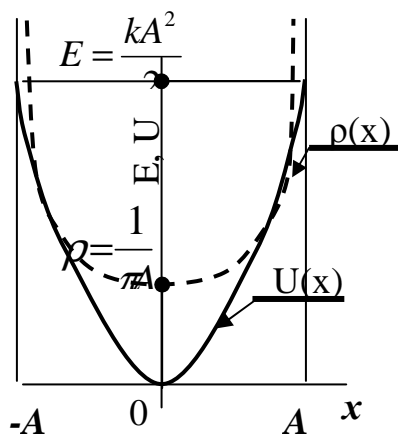


Рисунок 32.4

Гармонійним осцилятором називається система або матеріальна точка які утримуються в положенні рівноваги пружними або квазіпружними силами. Класичний гармонійний осцилятор розглянуто в пп. 19.4, 19.6. Осцилятор виконує гармонійні коливання за законом  $x = A \sin(\omega t + \alpha)$ , його

потенціальна енергія  $U = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$  має графік залежності від зміщення у вигляді параболи (рис. 32.4) – тому вивчається

**поведінка частинки в параболічній ямі.** Спочатку розглянемо деякі, цікаві для нас на даному етапі вивчення, особливості поведінки класичного осцилятора. По перше його рух виконується в межах інтервалу  $[-A, +A]$ . По друге, і це дуже важливо, ймовірність знайти осцилятор у вказаному інтервалі  $dP(x) = \frac{2dt}{T}$ , де  $T$  – період коливань. Густина ймовірності мати

осцилятор в точці з координатою  $x$   $\rho(x) = \frac{dP(x)}{dx} = \frac{2dt}{Tdx} = \frac{2}{T} \left( \frac{dx}{dt} \right)^{-1}$ . Після підстановки відповідних значень отримаємо:

$$\rho(x) = \frac{1}{\pi A \sqrt{1 - x^2/A^2}}. \quad (32.1)$$

Як це слідує з співвідношення (32.1) густина ймовірності знайти осцилятор в досліджуваному інтервалі змінюється від значення  $\rho(0) = \frac{1}{\pi A}$  до  $\rho(A) \rightarrow \infty$

(див. рис. 32.4). Найменш ймовірно осцилятор знаходиться в центрі потенційної ями, де він рухається з максимальною швидкістю. На краях потенційної ями, в крайніх точках інтервалу руху, де напрямок руху змінюється на протилежний, осцилятор зупиняється, що відповідає густині ймовірності знайти його в цих точках прагне до нескінченності.

Для дослідження *особливостей поведінки квантового осцилятора, особливостей поведінки квантової частинки в параболічній потенційній ямі*, запишемо закон його руху. Це стаціонарний одномірний рух, тому закон його руху [див. рівняння Шредінгера (31.7)]:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (32.2)$$

Для розв'язання цього диференціального рівняння, для пошуку аналогічних диференціальних рівнянь, розв'язки яких відомі, пере позначимо постійні коефіцієнти:

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \beta; \quad \frac{m\omega}{\hbar} = \alpha. \quad (32.3)$$

Рівняння (32.2) прийме вигляд:  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2) \psi = 0$ , в якому зробимо

заміну змінних:  $\sqrt{\alpha}x = z \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha \frac{d^2\psi}{dz^2}$ , що приведе, після ділення на  $\alpha$ , до відомого в математиці рівняння:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left( \frac{\beta}{\alpha} - z^2 \right) \psi = 0, \quad (32.4)$$

яке шляхом підстановки  $\psi(z) = e^{-\frac{z^2}{2}} H(z)$  зводиться до так званого рівняння Чебишева-Ерміта. Для  $H(z)$  розв'язки шукають у вигляді ряду, і воно повинно мати вигляд поліному, в протилежному випадку  $\psi(x)$  не перетворюється в нуль на нескінченності. Вимоги обриву ряду на деякому числі та стандартні вимоги до  $\psi$ -функції потребують щоб коефіцієнт  $\frac{\beta}{\alpha}$  приймав значення непарних чисел натурального ряду:  $\frac{\beta}{\alpha} = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1$ ;  $n = 0, 1, 2, \dots$ , що накладає обмеження на можливі значення енергії осцилятора:

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (32.5)$$

Власні функції мають вигляд:  $\psi_n(x) = e^{-\frac{x^2 m \omega}{2\hbar}} H_n \left( \frac{x}{\sqrt{\alpha}} \right)$ , де

$H_n \left( \frac{x}{\sqrt{\alpha}} \right) = H_n(z)$  - так звані поліноми Чебишева-Ерміта:

$H_0(z=1)$ ;  $H_1(z) = 2z$ ;  $H_2(z) = 4z^2 - 2$  і так далі.

Відповідна густина ймовірностей  $\rho(x) = \psi_n^2(x)$  для деяких станів осцилятора, що визначаються власними функціями, представлені на графіках рис. 32.5, де пунктирною лінією виконані розподілення густини ймовірностей

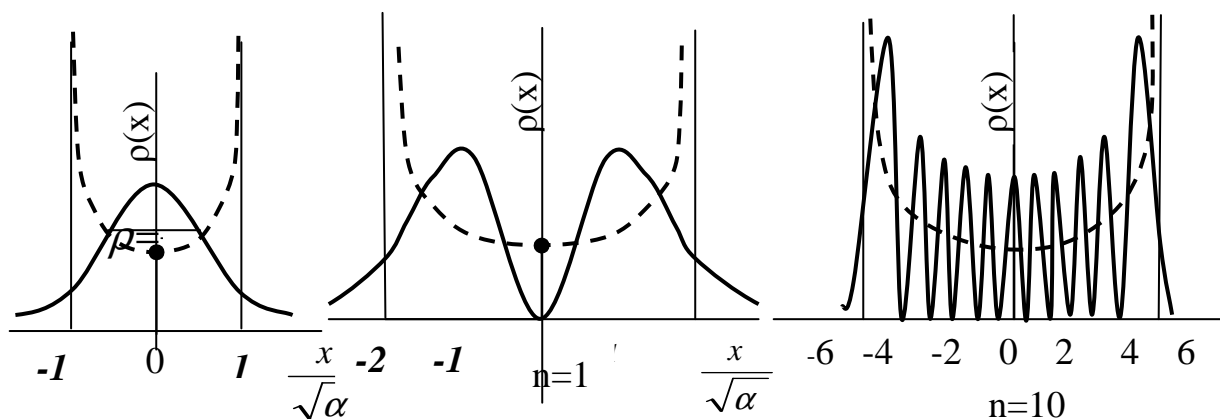


Рисунок 32.5

знаходження класичного осцилятора в точках розглядуваного інтервалу руху. Найбільші відмінності в поведінка класичного та квантового осциляторів полягають в тому, що квантовий осцилятор з певною ймовірністю може знаходитись за межами дозволеного інтервалу рухів. Класичний осцилятор принципово не може виходити за межі руху в інтервалі  $[-A, +A]$  (див. пунктирну лінію на рис. 32.5). Крім того, суттєві відмінності в залежності густини ймовірностей за малих значень енергії системи, тобто за малих значень квантового числа  $n$  (див. рис. 32.5 для  $n=0$  та  $n=1$ ).

Із збільшенням енергії осцилятора (для  $n=10$  на рис. 32.5) графіки становляться більш подібними і, за  $n \rightarrow \infty$ , очевидно, графіки може співпадуть. Тобто поведінка квантового осцилятора за високих енергій, коли значення кванту енергії прагне до нуля в порівнянні з загальною енергією системи, не відрізняється від поведінки класичного осцилятора.

Особливий інтерес має дослідження енергії квантового гармонійного осцилятора, що впливає з аналізу формули (32.5). По перше, без зайвих гіпотез слідує, що **енергія осцилятора квантується, приймаючи значення рівно віддалені квантом енергії**  $\varepsilon = \hbar \omega$  (див. рис 32.6).

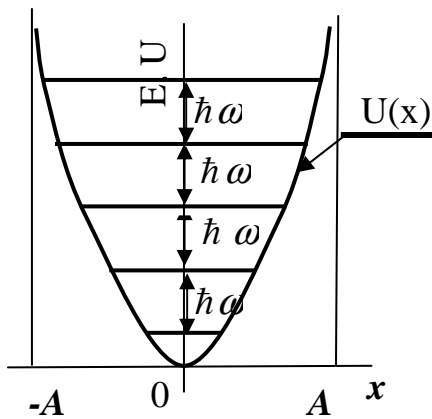


Рисунок 32.6

Надзвичайно важливим є теоретичний **висновок про існування нульової енергії осцилятора**:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad (32.6)$$

який має експериментальне підтвердження, що ще раз підтверджує правильність основних положень квантової механіки.

Дослідження вказують на те, що і за температур  $T \rightarrow 0$  у атомів зберігається деякі «нульові коливання», на яких відбувається розсіювання світла. Цим нульовим коливанням і відповідає нульова енергія осциляторів.

Нульові коливання є характерною ознакою довільної системи частинок, що розглядаються квантовою механікою. Нульова енергія дозволяє зрозуміти, чому гелій є єдиною речовиною, яка може існувати в рідкому стані за температур  $T \rightarrow 0$ . Це пов'язано по-перше з тим, що у гелію частота коливань

атомів  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  за малої маси досить висока. Тому нульові коливання атомів

гелію  $\frac{\hbar \omega}{2}$  мають досить високе числове значення, а сили притягання атомів,

за рахунок забудованості валентних оболонок, малі. В результаті атоми гелію і при низьких температурах знаходяться в інтенсивному рухові, і гелій залишається в рідкому стані за температур близьких до абсолютного нуля.

Рідкий гелій називають квантовою рідиною, тому що причиною його рідкого стану є квантовий ефект – наявність нульових коливань, наявність нульової енергії.

### 3 Поводження частинки на прямокутному одномірному потенціальному бар'єрі. Тунельний ефект.

Розглядається одномірний рух частинки з енергією  $E$ , на шляху якої зустрічається потенціальний бар'єр  $U(x)$ . Графік залежності потенціальної енергії від координати має форму прямокутника (рис. 32.7)

Якщо частинка класична, то у випадку, коли енергія частинки  $E < U_0$ , вона або зупиниться на бар'єрі (удар непружний), або відіб'ється від бар'єру за умови пружного зіткнення. В межах під бар'єром, а тим більше за його межами, частинка принципово бути не може (під бар'єром кінетична енергія частинки була б від'ємною). Якщо енергія частинки  $E \geq U_0$ , Частинка зменшить свою швидкість в межах дії бар'єру (або зупиниться) і, після

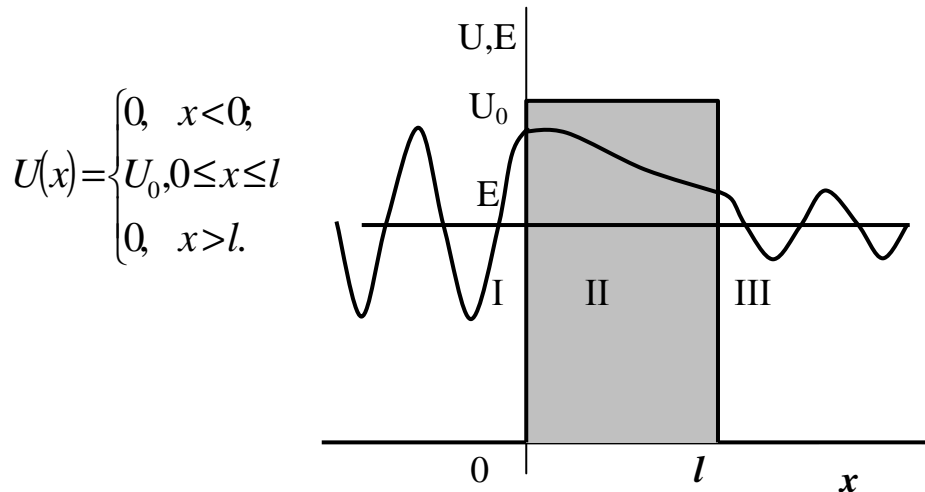


Рисунок 32.7

проходження бар'єру, знову прийме початкову швидкість.

Поведінка квантового об'єкту підкоряється стаціонарному рівнянню Шредінгера (31.7) для одновимірного руху. Тому, що рух в I, II та третій областях (див. рис. 32.7) принципово різний, необхідно скласти три рівняння, для кожної з областей руху окремо:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_I &= 0; \\ \frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi_{II} &= 0 \\ \frac{d^2 \psi_{III}}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{III} &= 0 \end{aligned} \quad (32.7)$$

Якщо перепозначити суттєво додатну величину  $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ ,  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  в рівняннях для першої та третьої областей руху, отримаємо диференціальні

$$\text{рівняння гармонійних коливань: } \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} + k^2 \psi_I = 0; \quad \frac{d^2 \psi_{III}}{dx^2} + k^2 \psi_{III} = 0,$$

розв'язками яких є гармонійні функції:

$$\psi_I = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}; \quad \psi_{III} = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, \quad (32.8)$$

Де складові з коефіцієнтами  $A_1$  та  $A_3$  відповідають рухові в додатному напрямку осі  $Ox$ , а доданки з коефіцієнтами  $B_1$  та  $B_3$  – рухові в зворотному напрямку, тобто це відбиті хвилі. Але тоді  $B_3 = 0$ , тому що хвилі завідомо ні від чого відбиватися.

В області руху II маємо  $(E-U_0)<0$ , тому, позначивши  $\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) = \alpha^2$ ,  $\alpha > 0$ , отримаємо рівняння  $\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \alpha^2\psi_{II} = 0$ , розв'язком якого є звичайні експоненти  $\psi_{II} = A_2 e^{\alpha x} + B_2 e^{-\alpha x}$ , що відповідають: перша зростанню, а друга спаданню амплітуди. Ці всі розв'язки і останній і розв'язки (32.8) графічно представлені на рис. 32.7 у вигляді відповідних синусоїд та згасаючої експоненти на ділянці руху під бар'єром.

Для знаходження чисельних значень коефіцієнтів, використовуються умови рівностей  $\psi$ -функцій та їх перших похідних на границях бар'єру  $x=0$  та  $x=l$ , а також умови нормування  $\psi$ -функції для загального руху. Не виконуючи вказаних процедур, скористаємося готовими результатами для аналізу висновків.

По-перше, виявляється, що є певна ймовірність частинці знаходитись під бар'єром, де класична частинка принципово бути не може, не вистачить її енергії. Кінетична енергія класичної частинки принципово не може бути від'ємною величиною. Для квантової частинки, завдяки її природи, завдяки існуванню співвідношень невизначеностей, точний поділ енергії на кінетичну та потенціальну неможливий, що дає можливість вважати знаходження частинки в області під бар'єром не протирічною обставиною. Більше того, частинка може існувати за межами бар'єру з густиною ймовірностей  $\psi_{III}^2$ , що в загальному випадку не дорівнює нулю. Можливість існування частинки за межами бар'єру, проходження частинки під бар'єром, отримало спеціальну назву «*тунельний ефект*» - частинка, фігурально виражаючись, прориває тунель під бар'єром. Коефіцієнт прозорості бар'єру, з точністю до чисельного коефіцієнту близького до одиниці

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}l} \quad (32.9)$$

Сильно залежить від висоти  $U_0 - E$  та від ширини  $l$  бар'єру.

Незвичайне, з точки зору класичної теорії, поведінки макрочастинок, тим не менше відоме в оптиці явище. Світло, падаючи під кутом, більшим за граничний кут повного внутрішнього відбивання, за умов відстані між двома середовищами, де проходить світло, співставної з довжиною світлової хвилі, проходить через бар'єр.

Якщо бар'єр має складну форму, як, наприклад, на рис. 32.8, дослідження дають для коефіцієнту його прозорості вираз:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx} \quad (32.9)$$

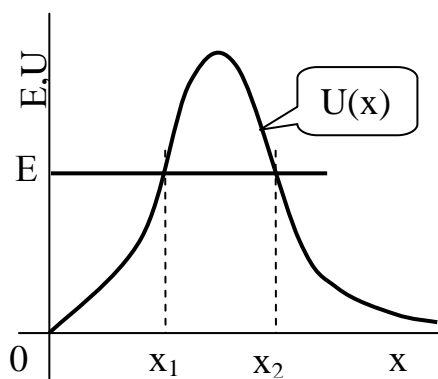


Рисунок 32.8

### 33 Елементи фізики атомів

1 Відомості з фізики атомів. Атомні спектри. Серіальна формула. Досліди Резерфорда. Ядерна модель атомів.

2 Постулати Бора. Теорія атома водню за Бором.

#### 1 Відомості з фізики атомів

Атом це найменша частка хімічного елемента, що зберігає його основні фізичні і хімічні властивості. Уявлення про розміри та масу атомів дає молекулярно-кінетична теорія речовини. Атоми займають розміри порядку  $10^{-10}$  м, мають масу порядку  $10^{-27}$  кг, їх концентрація, наприклад в воді, порядку  $10^{29}$  м<sup>-3</sup>. Атом - досить стійке утворення, в нормальному стані він не випромінює і не поглинає енергії. Випромінювання атомів має лінійчатий спектр, характерний для кожного сорту атомів і, наприклад, для атомів водню має досить просту залежність:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (33.1)$$

де  $\lambda$  - довжина хвилі;  $R$  - так звана постійна Рідберга;  $n_1$  і  $n_2$  - числа натурального ряду. В цій формулі вражає те, що це найбільш точна формула фізики і мабуть науки взагалі, а єдиними змінними є числа натурального ряду – це не могло бути випадковим, вони повинні мати фізичний зміст.

Вивчення процесів електролізу та газових розрядів привело дослідників до висновку, що атом має в своєму складі від'ємно заряджену часточку, яка отримала назву «електрон». Встановлений факт, а також факт випромінювання і поглинання енергії атомами приводять до висновку, що атом не є неподільною часткою – він повинен мати внутрішню структуру. Дослідами Резерфорда і його учнів з зондування атомів  $\alpha$ -частками було встановлена так звана *ядерна модель* будови атомів. Атом в цілому пустий, практично вся його маса і весь додатний заряд сконцентровані в області з лінійними розмірами порядку  $10^{-15}$  м, в **ядрі атома**, яке в сто тисяч разів менше за атом. Електрони в кількості достатній для компенсації додатного заряду розташовані в просторі, який зайнятий атомом. Поведінка електронів в атомах не може бути на сучасному рівні встановлена експериментально – це питання теорії.

Перша спроба теоретичного осмислення результатів дослідження належить Резерфорду. За аналогією з сонячною системою, він пропонує планетарну модель атома: в центрі ядро, а електрони обертаються по орбітах як планети навколо Сонця. Але така модель виявилась не стійкою. Справа в тому, що електрони є зарядженими частинками і їх рух по орбітах навколо ядра є прискореним. А прискорений рух, згідно з законами класичної електродинаміки, супроводжується електромагнітним випромінюванням, яке вичерпує енергію електрона, як вказують на те розрахунки, за порядку

$10^{-8}$  с, і атом повинен припинити існування. Але ж атоми стійкі утворення. Інше протиріччя в тому, що в такому атомі не може бути станів без випромінювання і, крім того, спектр випромінювання в супереч досвіду, повинен бути суцільним.

Більш послідовна спроба врятувати планетарну модель атома належить датському фізику Нельсону Бору. Він зробив припущення, що електрон в атомі не підкоряється законам класичної електродинаміки.

В якості вихідної приймається планетарна модель будови атомів.

*Закони, яким підкоряється поведінка електронів в атомах, закони поведінки атомів Бор сформулював у вигляді постулатів.*

- 1) Електрони в атомах можуть знаходитись на стаціонарних орбітах не випромінюючи та не поглинаючи енергію. При цьому електрони і атом в цілому мають дискретний ряд значень енергії:

$$E_1, E_2, E_3, \dots, E_N, \dots \quad (33.2)$$

- 2) Тільки такі орбіти є стаціонарними, для яких електрон має момент імпульсу відносно центру цілочисельно кратним постійній Планка:

$$L_n = mV_n r_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (33.3)$$

- 3) Атоми випромінюють та поглинають електромагнітну енергію тільки при переходах між стаціонарними станами, при переходах електронів на менш віддалену від ядра стаціонарну орбіту відбувається випромінювання, а при переходах на більш віддалені - поглинання у вигляді квантів електромагнітної енергії:

$$h\nu_{n_1 n_2} = \hbar\omega_{n_1 n_2} = E_{n_2} - E_{n_1}. \quad (33.4)$$

Для перевірки правильності теорії необхідно зробити розрахунки енергії та, скориставшись постулатами, розрахувати спектри атомів. Якщо теорія не протирічлива, вона повинна підтвердити відому за дослідними результатами формулу (33.1).

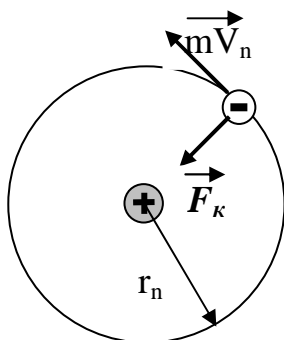


Рисунок 33.1

З метою розрахунків енергії атомів в стаціонарних станах, Бор скористався законами класичної електродинаміки руху електрона, що не є послідовним, звичайно. Розглядається найпростіша система – одноелектронна - це атом водню, або воднеподібні іони атомів (рис. 33.1).

Електрон рухається навколо ядра під дією кулонівської сили, які створюють доцентрове прискорення:

$$F_{\kappa} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_n^2} = \frac{mV_n^2}{r_n}. \quad (33.5)$$

Енергія електрона на  $n$  – тій стаціонарній орбіті ( $i$  атома в такому стані)

$$E_n = \frac{mV_n^2}{2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_n}. \quad (33.6)$$

Швидкість руху електрона та радіус відповідної орбіти знаходяться шляхом сумісного розв'язку рівнянь (33.3) та (33.5):

$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{mZe^2}; \quad V_n = \frac{1}{n} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar}. \quad (33.7)$$

Відповідно до формули (33.6) енергія в  $n$  - тому стані

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{8h^2 \epsilon_0^2}, \quad (33.8)$$

а відповідно до третього постулату [формула (33.4)] маємо для кванта енергії:

$$h\nu_{n_1 n_2} = h \frac{c}{\lambda_{n_1 n_2}} = \frac{mZ^2 e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (33.9)$$

звідки слідує, що

$$\frac{1}{\lambda_{n_1 n_2}} = \frac{mZ^2 e^4}{8h^3 c \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (33.10)$$

де  $\frac{mZ^2 e^4}{8h^3 c \epsilon_0^2} = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} (1,6 \cdot 10^{-19})^4}{8 \cdot (6,63 \cdot 10^{-34})^3 \cdot 3 \cdot 10^8 (8,85 \cdot 10^{-12})^2} = 1,08863 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} = R$

постійна величина, яка для атома водню дуже добре співпадає з експериментальним значенням цієї величини, відомої під назвою постійної Рідберга.

Таким чином отримано тріумфальний висновок, який підтверджує правильність, принаймні непротирічивість, теоретичних посилок. Ідея квантування енергії атомів була підтверджена експериментально в досліджах Франка і Герца з дослідження здатності поглинати енергію електронів атомами ртуті в залежності від їх енергії.

Дуже важливим висновком з теорії Бора є факт квантування енергії атомів та вираз залежності випромінюваної енергії у вигляді різниці двох функцій цілих чисел:

$$h\nu_{21} = T(n_1) - T(n_2), \quad (33.11)$$

так званих спектральних термів, висновок, що знаходить своє підтвердження і в сучасній теорії атомів. Але теорія Бора мала ряд суттєвих недоліків. Побудова теорії уже наступного за одноелектронними іонами атома гелію мала принципові труднощі. Німецький фізик А. Зоммерфельд спробував підправити теорію Бора, в її приміненні до багатоелектронних атомів, виконавши синтез квантової теорії та теорії відносності. Була розроблена квантова теорія еліптичних орбіт електронів, відома як теорія Бора-Зоммерфельда. Були введені інші квантові числа, що дало можливість пояснити відомі з практичної спектроскопії закономірності в атомних спектрах. Тим не менше, теорія Бора і теорія Бора-Зоммерфельда не є сучасними послідовними теоріями. З самого початку теорія Бора не є послідовною ні квантовою, ні класичною теорією, вона має штучне поєднання квантової теорії та класичної електродинаміки. Крім того, головне квантове число, що визначає собою значення енергії атому, вводиться через постулат 2), що визначає собою значення моменту імпульсу електрона відносно центру обертання. За сучасними уявленнями (підтвердженими дослідженнями, пов'язаними з дослідженням поляризації електромагнітного випромінювання атомів) значення цього квантового числа починається з нуля, що не може бути зрозумілим з позицій теорії Бора.

Сучасною теорією атомних структур є *квантова механіка*, що базується на уявленнях про хвильову природу мікрооб'єктів, яка проявляється в специфічних умовах про що була мова вище і будуть розглянуті деякі, необхідні для розуміння подальших досліджень, узагальнення теоретичного методу.

### ***34 Квантова теорія атома водню і воднеподібних іонів***

- 1 *Узагальнення рівняння Шредінгера.*
- 2 *Рівняння Шредінгера для атома водню та воднеподібних іонів. Квантування енергії, моменту імпульсу та проєкції моменту імпульсу.*
- 3 *Вироджені стани електрона та кратність їх виродження за енергією. Спектр атома водню та воднеподібних іонів.*
- 4 *Стани електронів в атомі водню. Електронні хмари. Електронні орбіталі.*
- 5 *Спін електрона. Досліди Штерна і Герлаха. Стани електронів в атомі водню та воднеподібних іонах.*

#### *1 Узагальнення рівняння Шредінгера*

Стаціонарне рівняння Шредінгера можна переписати більш компактно:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U \right) \psi = W\psi, \text{ або } \hat{H} \psi = W\psi, \quad (34.1)$$

де  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$  - означає послідовність дій, які необхідно виконати над  $\psi$ -функцією, щоб отримати праву частину рівняння. Це так званий *оператор енергії*, або *оператор Гамільтона*.

Особливість рівняння (34.1) полягає в тому, що дія оператора на  $\psi$ -функцію призводить до її множення на число. Такі числа називаються *власними значеннями* оператора енергії, а  $\psi$ -функції, що задовольняють такому рівнянню і, звичайно, стандартним умовам, - його *власними функціями*.

Стаціонарне рівняння Шредінгера у вигляді (34.1) дозволяє узагальнити його на випадок дослідження інших динамічних характеристик. Виявляється, що кожній динамічній характеристиці  $q$  відповідає оператор  $\hat{Q}$ . Зв'язок між операторами, такий як між відповідними динамічними характеристиками в динаміці матеріальної точки. Такий підхід дає можливість визначити ці оператори. Після чого складається операторне рівняння

$$\hat{Q} \psi = q \psi, \quad (34.2)$$

яке розв'язується на параметра в стані з власною  $\psi_i$ -функцією визначається за законами статистичної теорії: пошук власних значень оператора і власних функцій. Значення

$$q_i = \langle q_i \rangle = \int_V \psi_i^{\otimes} \hat{Q} \psi_i dV, \quad (34.3)$$

де  $V$  – об'єм простору існування частки:  $\psi_i$  і  $\psi_i^{\otimes}$  - відповідно  $\psi$ -функція і її комплексно спряжена функція в  $i$ -тому стані. Кутові дужки в символі параметра означають, що визначається середнє статистичне значення для досліджуваного стану. Квадрат модуля  $\psi_i$ -функції  $|\psi_i|^2 = \psi_i \psi_i^{\otimes}$  визначає собою просторовий розподіл густини ймовірності спостерігати частку в  $i$ -тому стані – хмару ймовірності, наприклад, електронну хмару в атомі.

Таким чином відбувається повне дослідження поведінки мікрооб'єктів. Визначаються значення їх динамічних характеристик і просторовий розподіл густини ймовірності спостерігати частку. Стан квантової частки задається розподілом ймовірностей реалізації на спектрі дозволених (власних) значень параметрів:

$$\begin{array}{ccccccc} |\psi_1|^2 & |\psi_2|^2 & |\psi_3|^2 & \dots & |\psi_N|^2 & \dots & \\ q_1 & q_2 & q_3 & \dots & q_N & \dots & \end{array} \quad (34.4)$$

2 Рівняння Шредінгера для атома водню та воднеподібних іонів. Квантування енергії, моменту імпульсу та проекції моменту імпульсу. Вироджені стани електрона та кратність їх виродження за енергією

Приймається ядерна модель будови атома. Для водню та воднеподібних іонів маємо масивне додатне ядро і один електрон. Ядро вважається нерухомим. Завдання теорії: в'яснити поведінку електрона. Потенціальна енергія електрона

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (34.5)$$

не залежить від часу і має сферичну симетрію. Тому рух електрона будемо вивчати за допомогою стаціонарного рівняння Шредінгера (34.1) або (34.2) в сферичній системі координат (рис. 34.1).

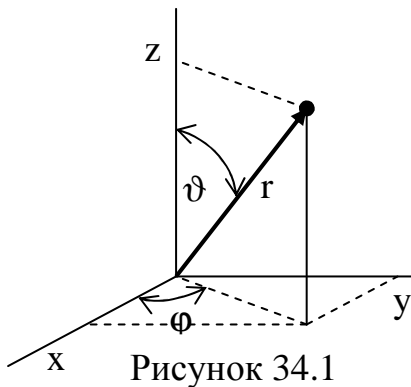


Рисунок 34.1

Рух електрона характеризується енергією  $E$ , орбітальним моментом імпульсу відносно центра атома  $\vec{L}$ , а також важливе значення має дослідження проекції орбітального моменту імпульсу на напрямок зовнішнього магнітного поля  $L_z$ . Відповідно складаються і розв'язуються стаціонарні рівняння:

- для енергії -

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \text{де } \hat{H} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)\psi, \quad (34.6)$$

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

сферичній системі координат  $(r, \theta, \phi)$ ;

- для модуля моменту імпульсу -

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi, \quad (34.7)$$

де  $\hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta\phi} = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$  - оператор квадрату

орбітального моменту імпульсу;

- для проекції орбітального моменту імпульсу на напрямок магнітного поля -

$$\hat{L}_z\psi = L_z\psi, \quad (34.8)$$

де  $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$  - оператор проекції моменту імпульсу.

Останнє рівняння досить просте, на ньому *проілюструємо механізм отримання результатів за допомогою рівняння Шредінгера*. Перепишемо це рівняння:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial z} = L_z \psi. \quad (34.9)$$

Рівняння (34.9) розв'язується шляхом розділення змінних:

$$\frac{\partial \psi}{\psi} = \frac{L_z}{-i\hbar} \frac{\partial z}{z} = i \frac{L_z}{\hbar} \frac{\partial z}{z}. \quad (34.10)$$

Як відомо, розв'язок рівняння (34.10) приводить до такого результату:

$$\psi = e^{i \frac{L_z}{\hbar} \varphi} = e^{im\varphi}, \quad \text{де } m = \frac{L_z}{\hbar}. \quad (34.11)$$

Одержане значення  $\psi$ -функції повинно задовольняти стандартним вимогам і однозначність цієї функції означає, що

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} e^{im2\pi}, \quad (34.12)$$

але така рівність можлива тільки за умови, що  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ , тобто приймає значення чисел натурального ряду. Зважаючи на співвідношення (34.10), маємо:

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (34.13)$$

Рівняння (34.7) і (34.6) мають розв'язок у вигляді так званих шарових функцій [7], які задовольняють стандартним вимогам, тільки за умови, що

$$\frac{L^2}{\hbar^2} = l(l+1), \quad \text{тобто що } L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad \text{де } l = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (34.14)$$

і що

$$E = -\frac{1}{(n_r + l + 1)^2} \frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2}, \quad \text{де } n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (34.15)$$

За звичаєм вираз  $n_r + l + 1$  перепозначають літерою  $n$ :  $n = n_r + l + 1$ . Взявши до уваги відповідні значення  $n_r$  і  $l$  з виразів (34.14) і (34.15), маємо

$$n = 1, 2, 3, \dots; \quad l \leq n - 1; \quad l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1) \dots \quad (34.16)$$

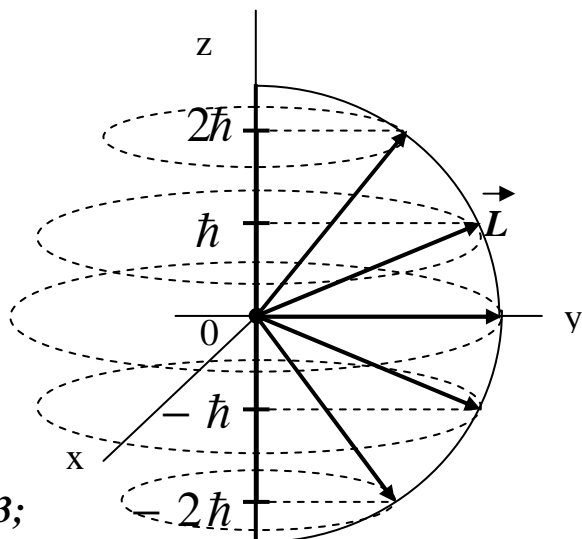
Цілі числа  $n$ ,  $l$ ,  $m$  називаються **квантовими числами**:  $n$  - **головне**, тому що визначає головний параметр стану електрона в атомі – його енергію:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} = -\frac{Z^2}{n^2} E_0, \quad \text{де } E_0 = \frac{me^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} = 13,6 \text{ еВ}; \quad n = 1, 2, 3, \dots; \quad (34.17)$$

$l$  - **орбітальне**, тому що визначає орбітальний момент імпульсу [за формулою (34.14)];  $m$  - **магнітне**, - воно визначає дозволених значення проекції орбітального моменту імпульсу на напрямок зовнішнього магнітного поля [за формулою (34.15)] і, одночасно, значення проекції на цей самий напрямок магнітного орбітального моменту електрона:

$$(p_m)_z = \frac{e}{2m_e} L_z = m \frac{e\hbar}{2m_e} = m\mu_B; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \quad (34.18)$$

де  $\frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_B = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ A} \cdot \text{m}^2$  – магнетон Бора.



$n=3;$   
 $l=2;$   
 $m_l=0, \pm 1, \pm 2$

Рисунок 34.2

Звернемо увагу на той факт, що квантується (приймає дискретний ряд дозволених значень) тільки проекція моменту імпульсу на напрямок зовнішнього поля. Інші проекції  $L_x$  та  $L_y$  можуть приймати довільні (в межах дозволеного) значення (рис. 34.2). Така поведінка орбітального моменту імпульсу електрона носить назву **просторового квантування**. Можливість приймати нульові значення як для модуля моменту імпульсу [див. формулу (34.14)]

так і його проекцій [див. формулу (34.13)] по-перше впливає із фізичного сенсу отримуваних квантовою механікою значень характеристик руху як їх середньо статистичних значень за станом, а по-друге знаходить експериментальне підтвердження.

### 3 Вироджені стани електрона та кратність їх виродження за енергією. Спектр атома водню та воднеподібних іонів

З наведених вище результатів слідує той факт, що стан електрона в атомі водню (та воднеподібних іонах) визначаючись  $\psi$ -функцією, залежить від всіх трьох квантових чисел: головного, орбітального та магнітного, а енергія електрона визначається тільки головним квантовим числом [див. формулу (34.17)]. Виявляється, що декілька різних станів електрона в атомі мають однакову енергію. Такі стани електронів називаються **виродженими** (за енергією), а кількість вироджених станів – **кратністю виродження**. Зробимо підрахунок кратності виродження станів електронів у атома водню. Враховуючи співвідношення (34.16) та (34.18) між значеннями квантових чисел, отримаємо для кратності виродження:

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{2(n-1)+1+1}{2} n = n^2. \quad (34.19)$$

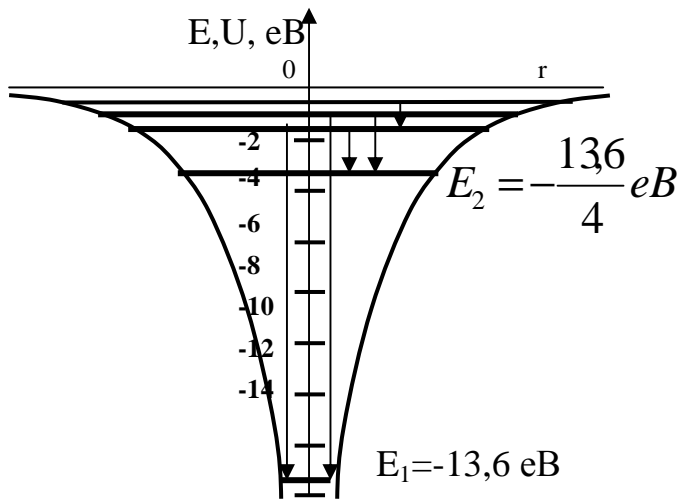


Рисунок 34.3

Тобто всі стани електронів в атомі водню та воднеподібних іонах  $n^2$  – кратно вироджені за енергією.

З виразу для потенціальної енергії електрона (34.5) слідує, що електрон в атомі водню рухається в гіперболічній потенціальній ямі (рис. 34.3). Поза межами атома енергія електрона дорівнює нулю та може приймати довільні значення, в середині атома енергія від’ємна і приймає дискретний ряд значень –

квантується [див. формулу (34.17)]. Співставте особливості квантування енергії для параболічної (рис. 32.6) та прямокутної (рис. 32.3) потенціальних ям для того, щоб звернути увагу на особливості квантування енергії квантового об’єкту в залежності від форми потенціальної функції.

Випромінювання енергії відбувається при переходах між стаціонарними станами електрона (див рис. 34.3) у вигляді кванта електромагнітної енергії:

$$\hbar\omega_{n_1n_2} = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{Z^2 m e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (34.20)$$

що добре узгоджується з експериментальною серіальною формулою (33.1), а також і з формулою (33.10), що впливає із теорії Бора, але цілі числа мають сенс головних квантових чисел і вона отримана послідовними методами квантової механіки. Інформація, отримана в процесі дослідження атома водню квантовою механіку, значно багатше: це і значення моменту імпульсу і просторова орієнтація вектора моменту імпульсу, що знаходить експериментальне підтвердження.

#### 4 Стани електронів в атомі водню. Електронні хмари. Електронні орбіталі.

Як відомо з положень квантової механіки і як на те було вказано в попередньому пункті, стани електрона в атомі водню та воднеподібних іонах визначаються  $\psi$ -функцією, яка, в свою чергу, залежить від трійки квантових чисел:  $\psi(r, \vartheta, \varphi) = \psi_{n,l,m_l}$ . Структура рівнянь Шредінгера (34.6), (34.7) та (34.8) дає можливість використати підстановку Фур’є, що дозволяє представити  $\psi$ -функцію у вигляді добутку радіальної та сферичної частин:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \psi_{n,l,m_l} = R_n(r) Y_{l,m_l}(\vartheta, \varphi). \quad (34.21)$$

Деякі із функцій, що представляють радіальні та сферичні частини  $\psi$ -функції для атома водню наведені нижче:

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

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos\vartheta; Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin\vartheta; Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \cdot \left(\frac{3}{2} \cos^2\vartheta - \frac{1}{2}\right), \quad (34.22)$$

де  $a = r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,526(\text{м})$ , радіус першої орбіти електрона в атомі водню за теорією Бора [див. формулу (33.7)] – так званий **перший борівський радіус**, який є прийнятим в якості константи для вимірювання атомних відстаней. Фізичний зміст отриманих рішень проявляється через визначення квадратів модулів  $\psi$ -функцій, що дають можливість розрахувати густини відповідних ймовірностей  $\rho(r, \vartheta, \varphi)$  знаходження електронів в точках атому з координатами  $(r, \vartheta, \varphi)$ .

Графічні зображення просторових розподілів густин ймовірностей знаходження електронів в заданих станах в атомах відповідними густинами точок (в умовних одиницях) мають форму хмар різної густини, тому вони отримали назву **електронних хмар**. Електронні хмари для деяких станів електронів в атомі водню представлені на рис. 34.4.

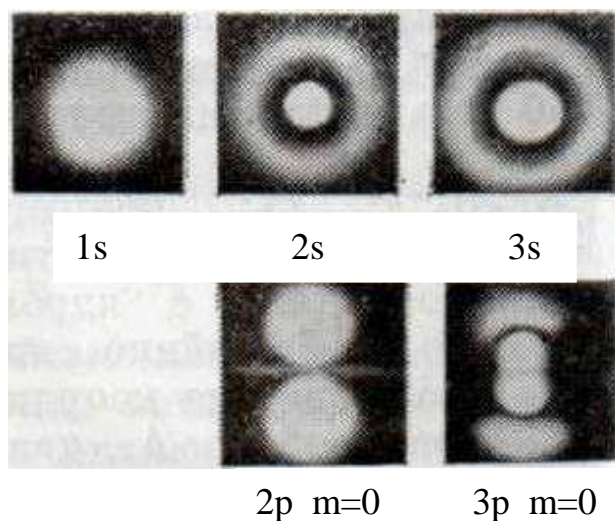


Рисунок 34.4

Електронні хмари не мають чітких границь в просторі. Для визначення та зображення форми електронної хмари вводиться поняття **електронної орбіталі** – поверхні, що передає форму електронної хмари і гарантує ймовірність знаходження електрона в нутрі неї, наприклад, 90%. Орбіталі  $ns$  мають форму сфери; орбіталі  $np$  – форму гантелей і таке інше. Основний стан електронів, стан  $1s$ , в атомах водню зображається сферичною орбіталлю (рис.34.5);

збуджений стан  $2p$  – гантелеподібними орбіталями і т. д.

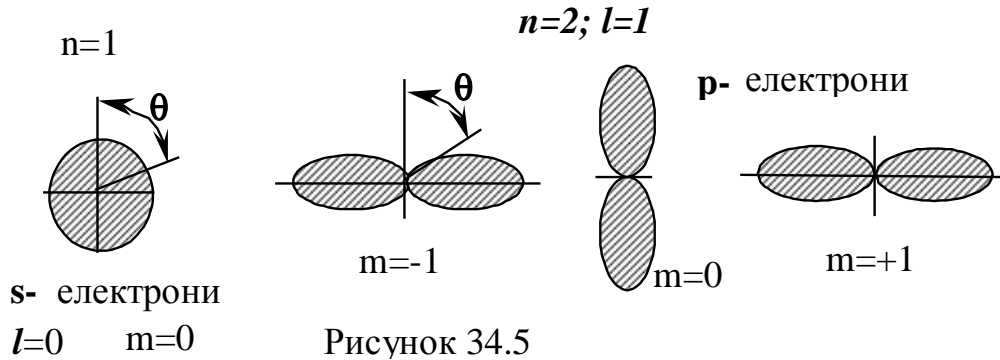


Рисунок 34.5

Для визначення ймовірності знаходження електрона на відстані  $r$  від ядра вводиться відповідна густина ймовірності:  $\rho(r) = \frac{dP(r)}{dr}$ , де

$dP(r) = |\psi(r)|^2 dV = |R(r)|^2 4\pi r^2 dr$  ймовірність знаходження електрона в сферичному шарі товщиною  $dr$  і об'ємом  $dV = 4\pi r^2 dr$ . Таким чином

$$\rho(r) = \frac{dP(r)}{dr} = 4\pi r^2 |R(r)|^2. \quad (34.23)$$

Графіки залежності  $\rho(r)$  для деяких станів електрона представлені на рис. 34.6. Пунктиром на рис. 34.6 зображені графіки залежності  $|R(r)|^2$  від  $r$ .

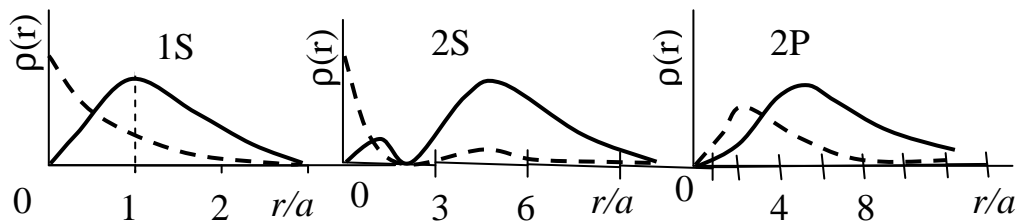


Рисунок 34.6

### 5 Спін електрона. Досліди Штерна і Герлаха. Стани електронів в атомі водню та воднеподібних іонів

Рівняння Шредінгера описує поведінку мікрочасток, що рухаються з дорелятивістськими швидкостями, тому воно не враховує аспекти внутрішнього руху електронів. Досвід вчить, що електрон має ступінь свободи внутрішнього руху, який проявляється в наявності **спіну електрона** – його **власного моменту імпульсу**  $L_s$  і зв'язаного з ним **спінового**

**магнітного моменту**  $\vec{p}_{ms} = -\frac{e}{m_e} \vec{L}_s$ , де  $\frac{p_{ms}}{L_s} = -\frac{e}{m_e} = \gamma_s$  – спінове

гіромагнітне відношення. Яке у два рази більше за орбітальне гіромагнітне відношення [див. п. 15.2 та формулу (15.6)].

Досліди, проведені Штерном і Герлахом, підтвердили наявність цих характеристик у електронів і вказали на те, що в просторі проекція спіну на напрямок магнітного поля може приймати тільки два значення:

$$L_{sz} = \pm \frac{1}{2} \hbar, \text{ де } m_s = \pm 1/2 - \text{спінове магнітне число, а } \sigma = 1/2 \text{ називають}$$

просто **спіном електрона**, хоча в дійсності спін, тобто власний момент

імпульсу електрона, 
$$L_s = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar, \text{ у відповідності до}$$
 співвідношення (34.14).

Таким чином, стан електрона в атомі, тобто і  $\psi$ -функція електрона, визначається чотирма квантовими числами: головним  $n$ , що визначає (в основному) значення енергії атома; орбітального  $l$ , що визначає модуль орбітального моменту імпульсу електрона; магнітного  $m_l$ , що визначає проекцію орбітального моменту імпульсу на напрямок магнітного поля; спінового  $m_s$ , що визначає значення проекції спіну на напрямок зовнішнього магнітного поля. Звертає на себе увагу факт, що енергія електрона в атомі залежить тільки від головного квантового числа, а його стан залежить від чотирьох квантових чисел, тобто декілька станів електрона в атомі мають однакову енергію. Такі стани електрона називаються *виродженими за енергією*. Кількість таких станів, вона дорівнює  $N = 2n^2$ , називається *кратністю виродження* [див. п. 34.3 і формулу (34.19)].

Умовно стан електрона в атомі позначають двома квантовими числами - головним і орбітальним, з вказанням кратності його виродження:  $nl_N$ . За звичаєм практичної спектроскопії головне число позначається цифрою 1, 2, 3, ..., а орбітальне - літерами  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  s, p, d, f, ... . Наприклад, стан, в якому  $n = 1$ , а  $l = 0$ , позначається як  $1s_2$ , де індекс 2 означає кратність виродження:  $N = 2 \cdot 1^2 = 2$ .

Одержані відповідні кожному стану електрона  $\psi$ -функції дозволяють побудувати розподіл густини ймовірності його знаходження в атомі – *електронні хмари* та відтворюючі їх форму *електронні орбіталі* (див. текст цього пункту теми вище).

Приклади станів електронів в атомі водню та воднеподібних іонах наведені в табл. 34.1.

Таблиця 34.1

$n$	$l$	$m_l$	$m_s$	Формула стану	Загальна кратність виродження
1	0	0	$\pm 1/2$	$1s^2$	2
2	0	0	$\pm 1/2$	$2s^2$	8

			2		
	1	-1	$\frac{\pm 1}{2}$	$2p^6$	18
		0	$\frac{\pm 1}{2}$		
		1	$\frac{\pm 1}{2}$		
3	0	0	$\frac{\pm 1}{2}$	$3s^2$	
	1	-1	$\frac{\pm 1}{2}$	$3p^6$	
		0	$\frac{\pm 1}{2}$		
		1	$\frac{\pm 1}{2}$		
	2	-2	$\frac{\pm 1}{2}$	$3d^{10}$	
		-1	$\frac{\pm 1}{2}$		
		0	$\frac{\pm 1}{2}$		
		1	$\frac{\pm 1}{2}$		
		2	$\frac{\pm 1}{2}$		

### **35 Багатоелектронні атоми**

1 *Особливості дослідження багатоелектронних атомів квантовою механікою. Енергетичні шари. Принцип Паулі. Принцип нерозпізнаності тотожних частинок. Пояснення закономірностей таблиці елементів.*

2 *Рентгенівське випромінювання. Суцільний та лінійчастий рентгенівські спектри.*

1 *Особливості дослідження багатоелектронних атомів квантовою механікою. Енергетичні шари. Принцип Паулі. Принцип нерозпізнаності тотожних частинок. Пояснення закономірностей таблиці елементів*

Приймається ядерна модель будови атома: в центрі атома додатне ядро з зарядом  $Ze$  і в області з лінійними розмірами порядку  $10^{-10}$  м знаходяться  $Z$  електронів. Проблема полягає в дослідженні поведінки електронів в атомі. Вона значно ускладнена порівняно з одноелектронною задачею.

Досліджуваний електрон взаємодіє не тільки з ядром, але також з кожним із  $Z-1$  рухомих електронів, їх взаємодія значно ускладнює потенціальну функцію [див. рівняння (31.6)], яка, крім того, залежатиме від часу; такий рух не є стаціонарним. Хоча складання рівняння Шредінгера для дослідження багатоелектронного атома не має принципових труднощів, його розв'язок у вигляді аналітичних точних функцій, принаймні на сучасному рівні розвитку математики, неможливий.

Для дослідження поведінки електронів у багатоелектронних атомах використовуються наближені методи. Одним з них є метод *адіабатичного наближення*. Він виходить з того, що ядро досить масивне порівняно з електронами і його вважають нерухомим, а електрони, навпаки, рухаються досить швидко, тому електричний заряд електронів можна вважати розмитим в просторі з густиною  $\frac{dq}{dV} = |\psi|^2 e$ . Таким чином, всі електрони, крім досліджуваного, можуть бути враховані за допомогою деякого екрануючого заряду ядра ефекту. Тобто можна вважати, що досліджуваний електрон рухається в центральному полі ядра з зарядом  $(Z - \sigma)e$ , де  $\sigma$  - *постійна екранування*, яка враховує вплив решти електронів. В такому підході задача зводиться до одноелектронної і, звичайно, висновки отримуємо такі самі. Стан електронів визначається четвіркою квантових чисел, і електронні хмари мають таку саму конфігурацію у відповідних станах; модуль їх орбітального моменту імпульсу і його проекція на напрямок магнітного поля квантуються [див. формули (34.14) і (34.13)]; енергія атома також квантується [див. формулу (34.17)] і приймає значення

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m(Z - \sigma)^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} = -\frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} E_0, \text{ де } n = 1, 2, 3, \dots \quad (35.1)$$

За принципом мінімуму енергії всі електрони атома повинні бути в стані  $1s$ , з енергією  $E_1$ . Але досвід, заснований на вивченні потенціалів іонізації (тобто напруги, необхідної для видалення кожного з електронів за межі атома), коефіцієнтів поглинання рентгенівського випромінювання певної довжини хвилі різними атомами, свідчить, що електрони в атомі знаходяться в різних енергетичних станах. Аналіз експериментальних результатів дозволив В. Паулі сформулювати принцип, який дає змогу зрозуміти закономірності розташування електронів в атомі. **Принцип Паулі** стверджує, що в квантовій системі не може існувати двох електронів в однаковому стані, з однаковою четвіркою квантових чисел. Цей принцип є наслідком більш загального **принципу нерозпізнаності тотожних квантових часток**. Принцип нерозпізнаності базується на тому факті, що стан квантового об'єкту визначається  $\psi$ -функцією, а вимірюваною величиною, є квадрат її модуля  $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ . Серед квантових об'єктів є такі, що їх стан описується або парними, або непарними  $\psi$ -функціями. Однаковому квадрату модуля  $\psi$ -функції можуть відповідати парні і непарні

$\psi$ -функції. Але суперпозиція непарних  $\psi$ -функцій дає нуль, тому частки, стан яких описується непарними  $\psi$ -функціями, не можуть бути більше однієї в заданому стані. Такими частинками, як виявляється, є частинки з напівцілими спінами:  $\sigma=1/2, 3/2, 5/2, \dots$ . Навпаки, частинки, стан яких описується парними функціями, це частинки з нульовим, або цілочисельним спіном:  $\sigma=0, 1, 2, \dots$ , є колективістськими частинками і вони можуть накопичуватись в заданому стані в довільних кількостях; такими частинками є фотони, наприклад. Принцип Паулі і, як більш загальний, принцип нерозпізнаності вводяться в апарат квантової механіки штучно.

З принципу Паулі і принципу мінімуму енергії виходить, що електрони в атомі розташовані за **енергетичними шарами (енергетичними оболонками)**, в яких не може бути більше електронів, ніж кратність виродження даного стану, тобто не більше, ніж  $N = 2n^2$  електронів. За символікою, прийнятою в практичній спектроскопії, енергетичні шари позначаються літерами латинського алфавіту: для  $n=1$   $N=2$  це К-шар;  $n=2$   $N=2 \cdot 2^2=8$  це L-шар;  $n=3$   $N=2 \cdot 3^2=18$  це M-шар;  $n=4$   $N=2 \cdot 4^2=32$  це N-шар і так далі (рис. 35.1). В незбудженому стані електрони атомів займають стани з

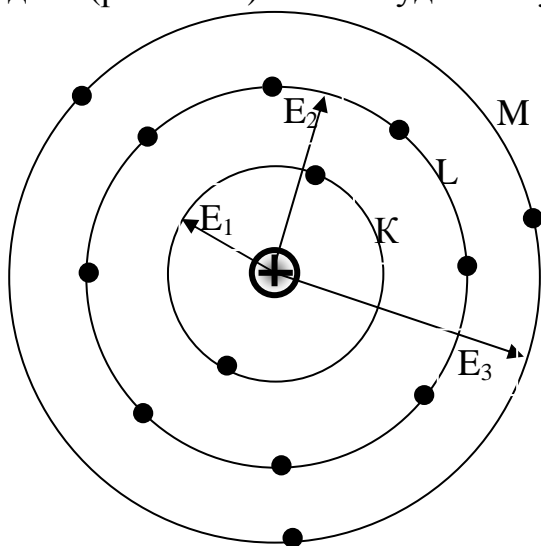


Рисунок 35.1

найменшою з можливих енергією. Найбільш енергійні електрони знаходяться на так званому валентному рівні. На рис. 35.1 валентні електрони знаходяться в M-шарі, їх три валентних електрони. Символічна формула **електронної конфігурації** такого атома  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ . Звернемо увагу на те, що зображені енергетичні шари і радіуси їх енергетичні, тобто такі, що визначають енергію шару.

Виконані дослідження дозволяють зрозуміти закономірності в розташування хімічних елементів в періодичній таблиці елементів та періодичність їх хімічних

властивостей обумовлених поведінкою валентних електронів.

Атом водню має один електрон в К-шарі який є валентним електроном, тобто водень одновалентний елемент, він добре вступає в хімічні реакції, проявляє металічні властивості. Слідуючи йотом гелію має два електрони в К-шарі, що насичають його. Енергія іонізації К-електронів гелію 20,2 eV – гелій інертний газ. Гелій закінчує перший період в таблиці елементів. Наступний період починається елементом літію, в якому третій електрон за принципом Паулі уже не може знаходитись в К-шарі, і займає найнижче енергетичне положення в L-шарі. Одновалентний літій проявляє металічні властивості. Другий період закінчується інертним газом неоном, у якого L-шар стає заповненим. Послідовність заповнення енергетичних шарів зберігається до атому аргону, у якого 18 електронів і аргон є інертним газом,

що закінчує собою третій період. Слідуючий 19-тий електрон атому калію повинен належати також М-шару, але хімічні та оптичні властивості калію, як на те вказує досвід, аналогічні властивостям елементів першої групи Li та Na, у яких валентний електрон знаходиться в s-стані. Це можливо коли 19-тий електрон перейде до N-шару в стан 4-s. Наближені методи дослідження не дозволяють зрозуміти таке явище, але загальні міркування дозволяють дати йому тлумачення. Справа в тому, що в розглянутому вище наближеному методі не враховано можливий вплив решти електронів на залежність енергії досліджуваних електронів від величини та просторової орієнтації у внутрішньому магнітному полі електронів моменту імпульсу та магнітного моменту електрона. Такий вплив, звичайно, існує і тому енергетичні шари розпадаються на підшари, тобто знімається виродження станів. Енергія електронів залежить від всіх чотирьох квантових чисел, що і приводить до того, що енергія 4s-підшару є меншою за енергію 3d-підшару. Маючи таке пояснення, яке кількісно формулюється у вигляді допоміжних принципів, закономірності розташування елементів та особливості їх хімічних та оптичних властивостей є повністю зрозумілою.

## 2 Рентгенівське випромінювання. Суцільний та лінійчатий рентгенівські спектри.

Як на те вказують теоретичні дослідження вище та досвід, електромагнітне випромінювання та поглинання атомів в оптичному діапазоні пов'язано з переходами між їх валентними рівнем та збудженими рівнями енергії. Переходи електронів між внутрішніми енергетичними шарами або переходи між збудженими та внутрішніми станами пов'язані із значно більшими змінами енергії і відповідають випромінюванню рентгенівського діапазону.

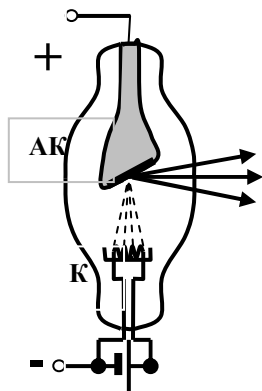


Рисунок 35.2

Технічно рентгенівське випромінювання утворюється в пристроях, що носять назву рентгенівських трубок (рис. 35.2). Скляний прозорий балон, в якому підтримується тиск порядку  $10^{-6}$  мм.рт.ст. і вмонтовано два електроди: розжарюваний катод K та антикатод АК. Між електродами підтримується висока різниця потенціалів порядку десятків тисяч вольт.

Сфокусований пучок електронів, розігнаних електричним полем, потрапляє на антикатод. Взаємодія енергійних електронів з матеріалом антикатоде призводить до виникнення рентгенівського електромагнітного випромінювання з довжинами хвиль меншими за  $10^{-10}$  м.

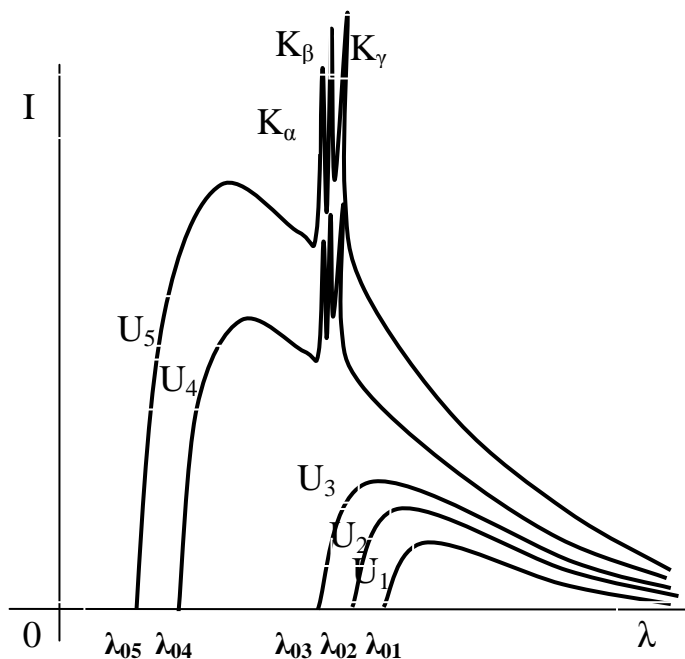


Рисунок 35.3

Дослідження вказують на те, що рентгенівський спектр має дві різні складові (рис. 35.3). По-перше це випромінювання з **суцільним спектром**, так зване **біле**, що не залежить від матеріалу катоду, а його інтенсивність та розподіл за довжинами хвиль повністю визначається величиною прикладеної різниці потенціалів. Дуже важливою ознакою білого випромінювання є існування короткохвильової межі  $\lambda_0$  (див. рис. 35.3), яка підкоряється дослідному співвідношенню:

$$\lambda_0 = \frac{1,24}{U} \text{ м}, \quad (35.2)$$

де напруга виражена в кіловольтах.

Із збільшенням напруги на суцільний спектр накладається так зване **характеристичне випромінювання**, яке має лінійчатий спектр і повністю залежить від матеріалу антикатоду. Лінії характеристичного випромінювання згруповані за серіями К, L, М-серії. В кожній серії лінії позначаються як  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$ ,  $K_\gamma$ , ...;  $M_\alpha$ ,  $M_\beta$ , ...;  $L_\alpha$ ,  $L_\beta$  і так далі. Дослідження залежності частоти, що відповідає лінії  $K_\alpha$  від природи речовини антикатоду англійський фізик Мозлі встановив закон (**закон Мозлі**):

$$\sqrt{\frac{v_{K\alpha}}{R}} = \sqrt{\frac{3}{4}}(Z - \sigma), \quad (35.3)$$

де  $Z$  – заряд ядра і порядковий номер в таблиці елементів;  $\sigma$  - постійна екранування;  $R$  – постійна Рідберга. Закон Мозлі дозволив уточнити, що елементи в періодичній таблиці розташовані за зарядами їх ядер.

**Суцільний рентгенівський спектр** є результат електромагнітного випромінювання електронів, розігнаних електричним полем трубки під час їх прискореного руху в результаті гальмування при проходженні біля ядер речовини антикатоду. Прискорення руху електронів та частота і інтенсивність випромінювання залежать від прицільної відстані до ядра і можуть змінюватись плавно в широкому діапазоні, але існування короткохвильової межі білого рентгенівського спектру не може бути зрозумілим в рамках класичних уявлень про електромагнітне випромінювання як про хвилі певного діапазону і знаходить повне, і якісне, і кількісне пояснення в рамках квантових уявлень. Дійсно, набувши енергію  $eU$  в електричному полі рентгенівської трубки, електрон може її випромінити **максимально** у вигляді одного кванту:

$$h\nu_0 = \frac{hc}{\lambda_0} = eU \rightarrow \lambda_0 = \frac{hc}{eU} = \frac{1,24}{U} \cdot 10^{-3} (\text{м}), \quad (35.4)$$

що в точності відповідає експериментальному закону (35.2).

*Характеристичне випромінювання* є результат переходів електронів атомів речовини антикатода на внутрішніх енергетичних рівнях і повністю узгоджується з теоретичними співвідношеннями. Дійсно, під дією енергійних електронів вибиваються електрони з внутрішніх електронних шарів і заповнюючись за рахунок більш енергійних зовнішніх електронів, випромінюють відповідні кванти енергії:

$$h\nu_{nk} = E_k - E_n = \frac{m(Z-\sigma)^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) = (Z-\sigma)^2 E_0 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right), \quad \text{де } \begin{matrix} n=1,2,3,\dots \\ k=n+1, n+2, \dots \end{matrix} \quad (35.5)$$

Із співвідношення (35.5) для лінії  $K_\alpha$ , тобто для переходу електронів з другого енергетичного шару в перший ( $k=2, n=1$ ) маємо:

$$\nu_{21} = \nu_{K\alpha} = (Z-\sigma)^2 \frac{E_0}{h} \frac{3}{4}, \quad (35.6)$$

що узгоджується з законом Мозлі.

### **36 Молекули. Молекулярні спектри**

1 *Молекули. Види хімічних зв'язків і типи молекул. Ковалентний зв'язок*

2 *Особливості молекулярних енергетичних спектрів. Комбінаційне розсіювання. Поняття про радіоспектроскопію.*

3 *Поглинання і випромінювання енергії молекулами. Вимушене випромінювання. Принципи роботи квантових генераторів.*

1 *Молекули. Види хімічних зв'язків і типи молекул. Ковалентний зв'язок*

**Молекулами** називаються найменші частинки речовини, що зберігають її основні хімічні та фізичні властивості. Молекули складаються з двох або більшої кількості однойменних або різнойменних атомів (в полімерних молекулах їх можуть бути тисячі). Той факт, що молекули є стійкими утвореннями свідчить про існування сил, які утримують атоми в молекулі. Експериментальні дослідження та теоретичні розрахунки дозволили встановити залежність результуючих внутрімолекулярних сил від відстані між атомами. На рис.36.1 представлено схематичне зображення залежності потенціальної енергії взаємодії двох атомів. На відстанях, що значно перевищують розміри атомів сили їх взаємодії прагнуть до нуля. З наближенням атомів виникають сили їх взаємного притягання, котрі на деяких відстанях порядку розмірів атомів переходять у сили відштовхування. На деякій, характерній для даних двох атомів відстані  $r_0$ , встановлюється рівновага сил притягання та сил відштовхування і відповідає мінімальній потенціальній енергії взаємодії атомів (див. рис. 36.1). Ця відстань носить

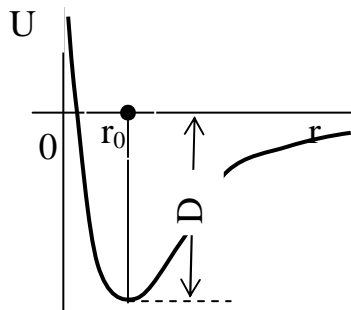


Рисунок 36.1

назву *довжини хімічного зв'язку* та відповідає *мінімальній енергії хімічного зв'язку D*.

Дослідження оптичних та рентгенівських спектрів випромінювання молекул вказують на те, що основні зміни відбуваються на рівні оптичних спектрів, що є принципово відмінним від спектрів

ізолюваних атомів. Рентгенівські спектри, пов'язані з переходами електронів на внутрішніх енергетичних станах електронів в атомах, залишаються практично незмінними при входженні атомів в молекули. Таким чином процеси утворення молекул обумовлені, в основному, поведінкою зовнішніх валентних електронів, що відповідають за оптичне випромінювання.

Дослідження процесів дисоціації молекул вказує на те. Що молекули розпадаються або на іони, або на нейтральні атоми, що відповідає існуванню двох типів хімічного зв'язку: *іонного (гетерополярного)* та *атомного (гомеополярного)*.

У випадку *іонного зв'язку (іонні молекули NaCl, NaF, LiF, ...)* з наближенням атомів настає момент, коли валентний електрон одного з атомів приєднується до другого атому. Атом, що втратив електрон, веде себе як додатно заряджена частинка з зарядом  $+e$ , а атом, що отримав лишній електрон, - як частинка з від'ємним зарядом  $-e$ . Потенціальна енергія

взаємодії між ними  $U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ , де  $r$  - відстань між центрами двох іонів.

У якості прикладу розглянемо процес утворення молекули LiF. Тому що енергія іонізації літію 5,4 еВ, а електронна спорідненість фтору 3,6 еВ, то результуюча енергія, необхідна для того, щоб видалити електрон літію та приєднати його до атому фтору, складає  $5,4 \text{ еВ} - 3,6 \text{ еВ} = 1,8 \text{ еВ}$ . Якщо обидва іони знаходяться на відстані  $r = 8 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , то  $U = 1,8 \text{ еВ}$ . Відповідно, на відстанях менших за  $r = 8 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , зовнішній електрон літію, перейшовши до атому фтору, виявиться в стані з меншою енергією. Мінімум енергії досягається на відстані  $r_0 = 1,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , що відповідає енергії хімічного зв'язку 4,3 еВ і відповідає стійкій молекулі LiF.

*Атомними (гомеополярними)* називаються молекули, що утворились в результаті злиття двох нейтральних атомів. Хімічний зв'язок атомів в гомеополярних молекулах називається *ковалентним зв'язком*. Ковалентний зв'язок має ряд особливостей, що не можуть бути поясненими в межах класичних уявлень. Ковалентний зв'язок має властивість *насиченості*, що виражається в валентності атомів, та *залежить від орієнтації спінів* валентних електронів. Названі властивості принципово відсутні у таких класичних сил як гравітаційні та електромагнітні. Ковалентний зв'язок крім молекул типу  $\text{H}_2$ , спостерігається у великій кількості неорганічних з'єднань та у багатьох органічних молекул (фтористий водень HF, окисел азоту NO, аміак  $\text{NH}_3$ , метан  $\text{CH}_4$  та інші). Найпростішою молекулою з ковалентним зв'язком є молекула водню  $\text{H}_2$ , що складається з двох протонів та двох електронів.

За наявності двох протонів енергія зв'язку електрона стає більшою ніж з одним протоном. З іншого боку електростатичне відштовхування протонів прагне розірвати зв'язок. Але, завдяки нерозпізнаності електронів (як тотожних частинок), кожен з них перебуває деякий час в оточенні іншого протона, якому він «не належав». При цьому, електронна результуюча хмара має тенденцію зосереджуватись в просторі між двома протонами, створюючи об'ємний від'ємний заряд  $|\psi|^2 e$ , до якого притягуються протони, що призводить до утворення особливого **квантовомеханічного обмінного зв'язку**, що залежить, в свою чергу, від орієнтації спінів електронів.

З квантовомеханічних розрахунків слідує, що при наближенні двох атомів водню, на відстані, спів ставній з першим борівським радіусом, за умови антипаралельних спінів електронів в атомах, виникають сили притягання атомі тим більші чим ближче протони. Квантовомеханічні ковалентні сили прагнуть до повного перекриття електронних хмар, але електростатичні сили відштовхування протонів їм протидіють і гра цих сил призводить до певної конфігурації молекули водню з відстанню між протонами  $r_0=0,74 \cdot 10^{-10}$  м та енергією хімічного зв'язку  $D=4,718$  еВ (див. рис. 36.1). За паралельних спінів електронів обидва атоми водню відштовхуються один від одного і молекула не утворюється.

## *2 Особливості молекулярних енергетичних спектрів. Комбінаційне розсіювання. Поняття про радіоспектроскопію*

Не приймаючи до уваги енергію руху молекул як цілого та виходячи з того, що ядерних перетворень не відбувається, можна тим не менше стверджувати, що у молекул, на відміну від атомів, існують особливі механізми зміни енергії, крім енергії електронного походження. Це механізми змін енергії, пов'язані з рухом окремих атомів, або окремих ядер, що входять до складу молекули, з їх взаємним обертанням та коливними рухами. В першому наближенні можна вважати, що всі ці види енергії є взаємно незалежними:

$$E = E_{ел} + E_{кол} + E_{об}, \quad (36.1)$$

де  $E_{ел}$  - енергія електронного походження;  $E_{кол}$  - енергія коливного та  $E_{об}$  - енергія обертального рухів молекул.

Енергія електронного походження, як це відомо з теорії атомів, квантова на і відстань між енергетичними рівнями порядку електрон-вольтів. Енергія взаємного розташування атомних остатків (див. рис. 36.1) в першому наближенні за не досить високих енергій коливань, має параболічну форму і, як це відомо з п. 32.2, також квантується:

$$E_{кол} = \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (36.2)$$

де  $v=0, 1, 2, \dots$  - коливне квантове число;  $\omega$  - частота коливань. Кількісні розрахунки дають відстань між коливними рівнями енергії молекул на порядок менше за енергію електронну.

Якщо вважати двох атомну молекулу ідеально жорстким утворенням, то кінетична енергія її оберտального руху  $E_{об} = L^2 / 2J_0$ , де  $L$  - момент імпульсу;  $J_0$  - момент інерції молекули. Дослідження вказують на те, що обертання двохатомної молекули може розглядатись як обертання однієї частинки з моментом інерції  $J_0$  та з масою, що дорівнює зведеній масі двох атомів. Момент імпульсу такої частинки квантується (див. рівняння 34.14):  $L = \sqrt{J(J+1)}\hbar$ , де  $J=0, 1, 2, 3, \dots$  - обертальне квантове число. Таким чином енергія обертального квантового рівня

$$E_{об} = \frac{J(J+1)}{2J_0} \hbar^2 \quad (36.3)$$

квантується, а розрахунок дає відстань між енергетичними обертальними рівнями ще на порядок менші за коливні.

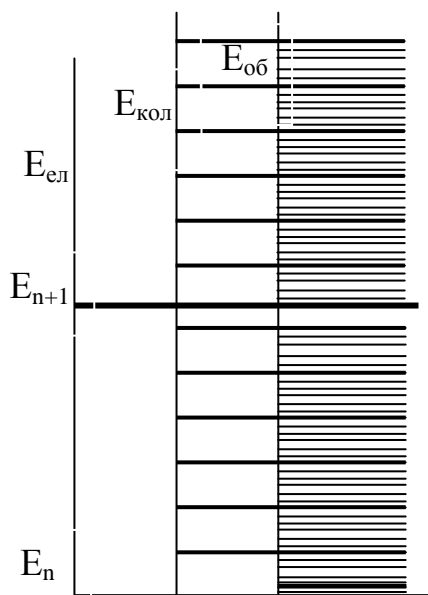


Рисунок 36.2

Енергетичні рівні молекули можуть бути представлені схемою як це виконано на рис. 36.2. Кожен з електронних енергетичних рівнів  $E_n$  розщеплюється на коливні рівні  $(E_{кол})_v$ , кожен з яких, в свою чергу, розщеплюється на обертальні рівні  $(E_{об})_J$ . Тому загальна структура енергетичних рівнів валентних електронів представлена в крайньому правому стовпчику діаграми на рис. 36.2.

Відповідно, оптичні спектри випромінювання та поглинання молекул принципово відрізняються від оптичних спектрів атомів. Кожна спектральна лінія, яка могла б відповідати переходам між відповідними електронними рівнями енергії, розщеплюється на велику кількість ліній, що відповідають переходам між коливними та обертальними енергетичними рівнями, перетворюючи спектральні лінії в спектральні смуги, що складаються з великої кількості близько розташованих спектральних ліній. **Молекулярні спектри** називаються **смугастими**.

Спектральні молекулярні смуги мають чітко виражені границі, що можуть бути розташованим як з боку довгих хвиль так і з боку коротких. Смуги розташовуються з певною послідовністю створюючи серії смуг.

Структура енергетичних рівнів молекул може бути детально досліджена за допомогою вивчення **комбінаційного розсіювання світла** молекулярними розрідженими газами. Явище полягає в тому, що в спектрі розсіювання, який виникає при проходженні світла через гази, рідини або прозорі тверді тіла, наряду з незміщеною спектральною лінією  $\nu_0$  з'являються нові лінії, частоти яких являють комбінації частоти падаючого світла та

частот коливних і обертальних переходів:  $\nu = \nu_0 \pm \nu_i$ . За останньою ознакою отримана назва «комбінаційне розсіювання світла».

Переходи між обертальними (ротаційними) рівнями молекул відповідають частотам радіодіапазону електромагнітних хвиль і можуть вивчатись за допомогою *радіоспектроскопічних методів*. Переходи між енергетичними рівнями супроводжуються випромінюваннями квантів електромагнітного випромінювання, що потребує законів збереження, які відображаються в так званих правилах добору. Що відповідають переходам із зміною квантових чисел на  $\pm 1$ . Перехід між  $J+1$  - шим та  $J$  - тим обертальними рівнями відповідає зміні енергії

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

де  $J$  - обертальне квантове число, а  $J_0$  - момент інерції молекули. Вимірюючи резонансну радіочастоту відповідного переходу  $\omega$ , отримуємо можливість визначити момент інерції молекули та зробити припущення про її будову:

$$\hbar\omega = \Delta E = \frac{\hbar^2}{J_0} (J+1) \Rightarrow J_0 = \frac{\hbar(J+1)}{\omega}, \quad (36.4)$$

де  $\hbar\omega$  - енергія кванта електромагнітного випромінювання, що відповідає резонансній частоті поглинання.

### 3 Поглинання і випромінювання енергії молекулами. Вимушене випромінювання. Принципи роботи квантових генераторів.

В нормальному незбудженому стані валентні електрони можуть знаходитись як завгодно довго. Зважаючи на співвідношення невизначеностей (31.5), бачимо, що енергія таких станів визначена абсолютно точно:  $\Delta E = 0$ . Але, якщо на атом потрапляє квант енергії, валентні електрони переходять в збуджений стан, в якому вони знаходяться проміжок часу порядку  $10^{-8}$  с, після чого *довільно* повертаються в стан з меншою енергією. Збуджені енергетичні рівні мають деяку кінцеву енергетичну ширину  $\Delta E > 0$ . Перехід між енергетичними рівнями підкоряється законам збереження енергії, імпульсу та моменту імпульсу (закон збереження спіну), ці правила виявляють себе в так званих *правилах добору*, які регламентують зміну деяких квантових чисел тільки на  $\pm 1$ .

Перехід в збуджений стан є *вимушеним*, він залежить як від особливостей атомної поглинаючої системи, так і від особливостей випромінювання, що поглинається нею. Розглядаючи рівноважне електромагнітне випромінювання в адіабатичній порожнині, А. Ейнштейн прийшов до висновку, що за наявності тільки цих двох механізмів - вимушеного поглинання і довільного випромінювання - рівновага не може встановитись. Повинен існувати ще механізм вимушеного випромінювання, яке б залежало не тільки від випромінюючої системи, але і від особливостей випромінювання, яке на нього падає. Таке *випромінювання* називається

*вимушеним*, воно має ряд важливих особливостей. Воно є висококогерентним з випромінюванням, що його визиває: за фазою коливань, за частотою коливань, за напрямком розповсюдження, за напрямком поляризації.

Ймовірність процесів вимушених поглинання і випромінювання, як показав Ейнштейн, абсолютно однакові і кількість актів поглинання і випромінювання залежать тільки від населеності електронами відповідних енергетичних рівнів. Якщо речовина, що складається з атомів, знаходиться в рівноважному стані, то населеність рівнів, тобто число електронів  $N(E)$  з енергією  $E$ , підкоряється статистиці Больцмана:

$$N(E) = A e^{-\frac{E}{kT}}, \quad (36.5)$$

де  $A$  – постійна нормування;  $k$  – постійна Больцмана. З формули (36.5) виходить, що рівні з меншою енергією населені більше, ніж з більшою. Якщо електромагнітне випромінювання пройде через таку рівноважну речовину, воно зменшить свою інтенсивність  $I$  за законом Бугера:

$$I = I_0 e^{-kx}, \quad (36.6)$$

де  $x$  – товщина шару речовини, а  $k$  – її коефіцієнт поглинання. Але виявляється, що можна створити такий стан речовини, в якому рівні з більшою енергією населені більше – *інверсна населеність*. Такий стан не є рівноважним, тому поняття температури для нього не використовується. Інколи кажуть, що це стан з від’ємною температурою [див. рівняння (36.5)], користуючись поняттям температури умовно.

Інверсна населеність енергетичних рівнів може бути створеною там, де є так звані *метастабільні рівні*. Це енергетичні рівні, перехід з яких заборонений *правилами добору*, але ця заборона не досить жорстка. Тому час життя таких рівнів може бути в мільйони разів довший за час життя нормальних збуджених рівнів, а їх населеність стає інверсною, електрони на них затримуються значно довше. Якщо через речовину, в якій є інверсна населеність енергетичних рівнів, проходить електромагнітне випромінювання відповідної до переходу з цих рівнів частоти, то, за рівної ймовірності переходів, число вимушених випромінювань переважає над числом поглинань, і електромагнітне випромінювання підсилюється.

Процес переведення середовища в інверсний стан називається *накачуванням підсилюючого середовища*. Суть методу створення такого стану полягає в тому, щоб за допомогою спеціальних молекулярних домішок вибірково зруйнувати деякі енергетичні рівні, на які відбувається спонтанний перехід електронів, і таким чином створити інверсну населеність рівнів. Іншим методом накачування є використання допоміжного випромінювання, яке створює надлишкову населеність верхніх рівнів в порівнянні з рівноважною. Практичне створення інверсної населеності проводиться завжди за трирівневою схемою.

В гелій-неоновому лазері підсилюючим середовищем служить плазма високочастотного розряду, що створюється в суміші гелію з неоном. За

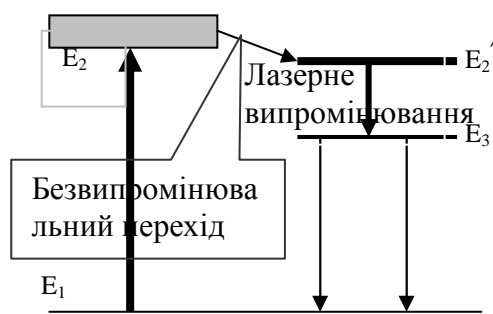


Рисунок 36.3

рахунок зіткнень з електронами атоми гелію переходять в збуджений стан з енергією  $E_2$  (рис. 36.3). Зіткнення збуджених атомів гелію з атомами неону призводять до збудження останніх і переходу на один з верхніх рівнів неону  $E_2'$ , розташованих близько до рівня  $E_2$ . Перехід з цього рівня на рівень  $E_3$  супроводжується випромінюванням лазера.

Прилади, в яких використовується цей ефект, називаються **квантовими підсилювачами, квантовими генераторами (КГ)** або, завдяки властивостям вимушеного випромінювання, **генераторами когерентного випромінювання (ГКВ)**. Якщо квантовий підсилювач працює в оптичному діапазоні, то це *ОКГ* або *лазер* (аббревіатура з англійської назви приладу); молекулярні підсилювачі в радіодіапазоні частот – *мазери*.

Лавиноподібне наростання інтенсивності світла в лазерах значно підсилюється за рахунок багатократного проходження підсилюваного світла

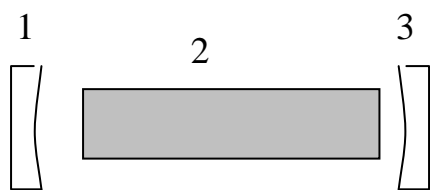


Рисунок 36.4

крізь один і той самий шар підсилюючого середовища. З цією метою підсилююче середовище, наприклад, кювета з сумішшю гелію і неону, розміщується між двома дзеркалами, які встановлені паралельно одне одному. Дзеркала можуть бути або плоскими, або, що частіше вживається, угнутими (рис. 36.4). Дзеркало 1 суцільне, а 3 - напівпрозоре.

Довільний фотон, що з'явився в підсилюючому середовищі 2, є зародком процесу генерації світла. Але, якщо фотон рухається перпендикулярно до площин дзеркал, то потік світла, збуджений ним, після взаємодії з напівпрозорим дзеркалом 3 частково повертається і проходить знову крізь підсилююче середовище. Підсилений і відбитий дзеркалом 1, світловий потік знову проходить крізь активне середовище і так далі. Такий процес називається *насиченням* в оптичному квантовому генераторі і він має свої особливості, які будуть зрозумілі на мові хвильових уявлень. З точки зору хвильових уявлень підсилення світла означає безперервне зростання амплітуди світлової хвилі. Але для цього необхідною умовою є співпадіння фаз відбитих хвиль з фазою первинної хвилі за довільної кількості відбивань. Співпадіння фаз відбувається за умови, що оптичний шлях світла цілочно кратно довжині хвилі. Такий пристрій називається *резонатором*. Промені, що виходять з напівпрозорого дзеркала, є результатом інтерференції багатьох когерентних хвиль, що мають різницю фаз кратну  $2\pi$ . Це забезпечує найбільшу результативну амплітуду і

інтенсивність світла, яке випромінює лазер. Інтерференція багатьох когерентних хвиль призводить до того, що інтерференційний максимум є дуже вузьким. На практиці виникає багато складностей, які дають поширення спектральних ліній, і реальний спектр складається з досить вузьких, розташованих на віддалі  $\Delta\nu = c/2L$ , ліній, де  $\Delta\nu$  - різниця частот;  $c$  – швидкість світла у вакуумі;  $L$  – оптичний шлях світла в лазері.

Однією з важливих особливостей випромінювання лазера є гостра направленість променів, яка обумовлена механізмом процесу вимушеного випромінювання та його проходженням в резонаторі. Фотон, що летить під кутом до осі резонатора, вийде з активного середовища. В генерації і підсиленні приймають участь тільки ті фотони, які летять паралельно осі резонатора. Тому світло лазера має гостру направленість.

Завдяки високій когерентності та гострій направленості випромінювання ОКГ, вони можуть з великою ефективністю використовуватись для зв'язку, локації, отримання дуже високих температур в малих об'ємах і так далі. За допомогою ОКГ можна встановлювати зв'язок на великих відстанях. Випромінюванням лазерів можна різати і пробивати дуже дрібні отвори в тугоплавких матеріалах, виконувати зварювання мікродеталей. ОКГ використовуються в хірургії. Перспективи використання лазерів ще далеко не вичерпані і є досить обнадійливими.

## **ІХ Основи фізики твердого тіла**

### ***37 Тверді тіла. Класифікація твердих тіл за типами сил зв'язку***

Характерною рисою твердого тіла є стабільність його форми в нормальних умовах і малі коливання атомів навколо деяких фіксованих положень рівноваги. За характером розташування цих рівноважних положень тверді тіла поділяються на кристалічні й аморфні. Кристали характеризуються правильним розташуванням рівноважних положень, названих вузлами кристалічних ґраток, і, відповідно, просторовою періодичністю усіх властивостей кристалів. Розташування атомів в аморфних тілах з термодинамічної точки зору є нерівновагим (метастабільним) і з часом аморфне тіло повинне кристалізуватися. Однак у звичайних умовах час переходу в рівноважний стан настільки великий, що аморфне тіло поводить себе практично необмежено довго як стійке тверде тіло.

Історично традиційним є використання твердих тіл як конструкційних матеріалів. При цьому на перший план виступають їхні механічні властивості, такі як міцність, пластичність, крихкість, вага. Використання твердих тіл у теле-, радіо-, електротехніці й у приладобудуванні обумовлено особливостями їх електричних, магнітних і оптичних властивостей:

напівпровідникові прилади і схеми, феромагнітні плівки, надпровідні елементи сучасних рахункових пристроїв та інше.

Розуміння природи властивостей твердих тіл можливо тільки на підставі їхнього дослідження квантовою механікою. У той час як квантова теорія кристалів розроблена дуже докладно, квантова теорія аморфних тіл знаходиться в стадії становлення. Надалі розглядаються тільки кристалічні тверді тіла, більш того, нас будуть цікавити в основному їхні електричні властивості.

Властивості твердих тіл зберігати свою форму пояснюються сильним зв'язком між їх атомами. Особливостями цих зв'язків пояснюються й електричні властивості кристалів. Відповідно кристали можна класифікувати за типами сил зв'язку як атомні, іонні, металеві і молекулярні.

Атомний, чи гомеополярний зв'язок є найбільш сильним з усіх типів зв'язку. Крім молекул, за цим типом зв'язку утворюються також і кристали. Типовими прикладами речовини з атомним зв'язком є алмаз, кремній, германій. Атомний зв'язок виникає між однаковими атомами в результаті особливого квантово-механічного ефекту, названого обмінним ефектом. Обмінні сили виникають при взаємодії між атомами за рахунок перекриття їхніх електронних хмар, що приводить до обміну електронами і до їхнього узагальнення. Найважливішою особливістю обмінної взаємодії є його різка залежність від орієнтації спінів електронів, що здійснюють зв'язок між атомами. Сильний зв'язок виникає тільки при антипаралельних спінах електронів. Другою найважливішою особливістю обмінної взаємодії є те, що він має властивість насичення, – зв'язок здійснюється тільки парою електронів. У силу цього атомний зв'язок називається парно-електронним зв'язком. Брати участь в обмінних зв'язках можуть тільки електрони зовнішніх незаповнених оболонок атомів, тому атомний зв'язок називають валентним або ковалентним. При атомному зв'язку імовірність знайти електрон поблизу одного з ядер взаємодіючих атомів може або бути однаковою, або різною. Граничним випадком атомного зв'язку є іонний зв'язок.

*Іонний, або гетерополярний зв'язок.* Типовим прикладом речовин з гетерополярним типом зв'язку є сполуки лужних металів з галогенами, наприклад, NaCl, NaF, LiF. У результаті утворення іонів  $\text{Na}^+$  і  $\text{Cl}^-$  між ними виникає кулонівське притягання. Взаємодія великого числа іонів різного знака приводить до утворення стійкої конфігурації, у якій, як правило, іони займають періодично правильні положення в просторі, тобто речовини з іонним зв'язком утворюють звичайно кристали.

*Металевий зв'язок.* Одним з різновидів атомного зв'язку є металевий зв'язок. Звичайно вважається, що зовнішні валентні електрони атомів металів колективізуються, належать одночасно всім ґраткам. Ця колективізація відноситься і до електронів внутрішніх оболонок, однак, їх «воля» значно обмежена.

*Молекулярний зв'язок.* Тверді тіла з молекулярним зв'язком характеризуються твердістю і низькою температурою плавлення. Типовими

прикладом молекулярних твердих тіл є органічні речовини. Окремі атоми в них утворюють комплекси, групи, що зв'язані між собою слабкими силами, такого ж типу, як і в рідинах.

### **38 Загальні відомості з квантової теорії твердих тіл**

1 *Поняття про квантову статистику. Розподіл станів та функції заповнення Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака.*

2 *Поняття про виродження квантових систем. Вироджений бозе-газ та формула Планка.*

1 *Поняття про квантову статистику. Розподіл станів та функції заповнення Бозе-Ейнштейна та Фермі-Дірака*

Тверді тіла є системами з великою кількістю структурних елементів (атомів, молекул, електронів) які можуть розглядатись як термодинамічні системи. Термодинамічні системи можуть вивчатись термодинамічним та статистичним методами. Термодинамічний метод не цікавиться природою структурних елементів і тому не потерпає принципів змін при його використанні для дослідження поведінки термодинамічних систем з квантових часток. Статистичний метод принципово виходить з конкретних уявлень про природу та закономірності руху окремих структурних елементів системи. Тому **квантова статистика**, яка вивчає поведінку термодинамічних систем квантових об'єктів, має свої особливості порівняно з класичною статистичною теорією (див. П.6.1).

Загальний підхід статистичної теорії виходить з того, що всі динамічні характеристики руху складових частинок об'являються випадковими величинами, фізичний зміст для яких мають тільки середньостатистичні значення. Визначення середньостатистичних значень динамічних характеристик відбувається за допомогою *статистичних розподілів частинок* за даними характеристиками. В основі всіх розподілів лежить *розподіл за координатами та імпульсами*, що є основними параметрами механічного стану частинок. Від розподілу за координатами та імпульсами переходять до *розподілу за енергіями*.

**Функція розподілу** будується на підставі конкретних уявлень про природу складових частинок системи та про особливості їх руху. Через наявність хвильових властивостей і принцип нерозпізнаності тотожних квантових частинок та пов'язані з ними співвідношення невизначеностей, квантованість енергії та різну заповнюваність станів частинок з цілочисельним і напівцілими спінами, необхідно установити окремо: як розподілені квантові рівні енергії, яка **густина енергетичних рівнів  $g(E)$**  і яка **імовірність заповнення частинками кожного з рівнів  $f(E)$** . У такому випадку число частинок, що мають енергію в інтервалі  $(E, E+dE)$ ,

$$dN(E) = f(E)g(E)dE. \quad (38.1)$$

Формально стан термодинамічної системи з  $N$  частинок може бути зображеним точкою в так званому *фазовому  $6N$ -вимірному  $\Gamma$ -просторі координат та імпульсів*. Завдяки співвідношенням невизначеностей стан частинок, що потрапили в елементарний фазовий об'єм  $\Delta\Gamma_0 = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = h^3$ , сприймається як один стан. Густина станів в елементарному фазовому об'ємі  $\Delta\Gamma$ , що відповідає енергіям з інтервалу  $(E, E+\Delta E)$ :

$$g(E) = \frac{\Delta\Gamma}{h^3}. \quad (38.2)$$

Для виявлення найбільш загальних особливостей квантової статистики вводиться ідеальний квантовий газ, у якому всі точки реального простору є рівноправними, тому  *$6N$ -вимірний  $\Gamma$ -простір* переходить в  *$6$ -вимірний  $\mu$ -простір координат та імпульсів*. Об'єм координат співпадає з фізичним об'ємом газу:  $\Delta x \Delta y \Delta z = V$ , а стан всієї системи вивчається в  *$3$ -вимірному просторі імпульсів* в одиничному об'ємі координат виділяється елементарний об'єм імпульсів

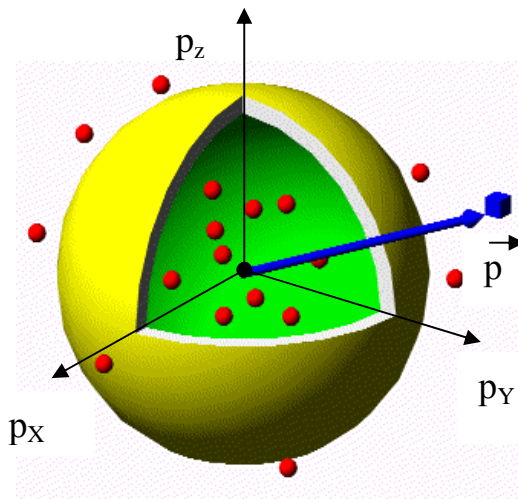


Рисунок 38.1

$$\Delta\mu = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{h^3}{V} \quad (38.3)$$

Через хаотичність руху частинок усі напрямки імпульсів рівноімовірні й у сферичному шарі простору імпульсів об'ємом  $4\pi p^2 dp$  (рис. 38.1) міститься число станів

$$dN_g(p) = g(p) dp = \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} V, \quad (38.4)$$

але число станів з даним імпульсом дорівнює числу станів з енергіями, обумовленими цими імпульсами:

$$dN_g(p) = dN_g(E) = dN_g(\lambda) \Rightarrow g(E)dE = g(\lambda)d\lambda = g(p)dp \Rightarrow g(E) = \frac{dN(p)}{dE} = \frac{4\pi p^2}{h^3} V \frac{dp}{dE}. \quad (38.5)$$

З огляду на зв'язок енергії й імпульсу:  $E = \frac{p^2}{2m}$  і  $p = \sqrt{2mE}$  маємо

$$\frac{dp}{dE} = \frac{m}{p} = \sqrt{\frac{m}{2E}}. \quad (38.6)$$

Після підстановки в рівність (38.5) одержимо **вираз для розподілу густини станів за енергіями**:

$$g(E) = \frac{4\pi m^{3/2} V}{h^3} \sqrt{E}, \quad (38.7)$$

тобто густина станів росте з ростом енергії пропорційно  $\sqrt{E}$ , як це показано на рис. 38.2.

**Імовірність заповнення станів частинками  $f(E)$** , або просто **функція розподілу**, визначає середнє число частинок у даному стані.

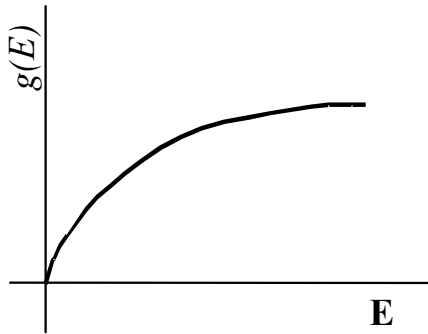


Рисунок 38.2

Система частинок з цілочисельними або нульовими спіном (фотони, фонони, деякі ядра атомів) підкоряється *квантовій статистиці*, розробленій незалежно індійським вченим Шатъендраватом Бозе та А. Ейнштейном, яка носить назву **статистики Бозе-Ейнштейна**, частинки, що їй підкоряються - **бозонами**. Для бозонів *функція розподілу*

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu)}{kT}} - 1}, \quad (38.8)$$

де  $k$  - постійна Больцмана;  $T$  - абсолютна температура системи;  $\mu = \frac{U - TS + pV}{N}$  - хімічний потенціал, віднесений до однієї частинки;  $U$  - внутрішня енергія системи;  $S$  - її ентропія;  $V$  - об'єм;  $p$  - тиск. *Хімічний потенціал* визначається роботою, яку необхідно виконати в ізобарно-ізотермічному процесі при збільшенні числа частинок на одиницю.

**Функцію розподілу для частинок з напівцілим спіном** розробили незалежно один від одного італійський вчений Енріко Фермі та англійський вчений французького походження Поль Діра́к. Квантова статистика для таких частинок називається **статистикою Фермі-Дірака**, а частинки з напівцілим спіном (електрони, протони, нейтрони та інші) називаються **ферміонами**.

Для ферміонів *функція розподілу*:

$$f_\Phi(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1}, \quad (38.9)$$

де  $E_F$  - представляє енергію (або рівень) Фермі.

## 2 Поняття про виродження квантових систем. Вироджений бозе-газ та формула Планка

*Термодинамічна система*, як окремий випадок ідеальний газ, *поведінка* якої не підкоряється закономірностям класичної статистики Максвелла-Больцмана, а *підкоряється статистикам Бозе-Ейнштейна або Фермі-Дірака*, називається **виродженою**. Ефект виродження системи пов'язаний з квантовими властивостями частинок системи. Тому параметри виродження

можна оцінити, виходячи із співвідношень невизначеностей. Якщо параметр невизначеності координати  $a$ , наприклад це розміри кристалічної ґратки, а невизначеність імпульсу порядку самого імпульсу частинки, то  $ap \geq h$ , де використана постійна Планка  $h$ , як це прийнято в фізиці твердого тіла. Об'єм

невизначеності  $a^3 = \frac{V}{N} = \frac{1}{n_0} \geq \left(\frac{h}{p}\right)^3$ , де  $V$  - об'єм системи;  $N$  - загальна кількість частинок;  $n_0$  - концентрація частинок. Енергія частинок  $E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow p = \sqrt{2mE}$ , тому  $\frac{h^3 n_0}{(2mE)^{3/2}} \leq 1$ . Вважаючи  $E = kT$ , та виходячи з

граничної ситуації, маємо для температури виродження  $T_g$ :

$$T_g = \frac{h^2 n_0^{2/3}}{2mk} \quad (38.10)$$

Оцінювана виразом (38.10) температура виродження відрізняється від отриманої більш строго тільки цілочисельним множником:

$$T_g = \frac{h^2 n_0^{2/3}}{2\pi mk} \quad (38.11)$$

Температурний критерій виродження:  $T \leq T_g$  - система частинок вироджена;  $T \geq T_g$  - система частинок не вироджена і її поведінка підкоряється класичним закономірностям.

Строга оцінка критеріїв виродження системи виходить з умови, що  $\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right) \gg 1$  і одиницею в знаменниках співвідношень (38.8) та (38.9)

можна нехтувати, а тому вони переходять у відоме співвідношення для

розподілу Больцмана:  $f(E) = \frac{dN(E)}{NdE} = e^{\frac{\mu}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} = A e^{-\frac{E}{kT}}$  - [див. розділ II, п.

6.2, співвідношення (6.26)]. Функція розподілу, як середнє число частинок в даному стані, в класичній та квантових статистиках можуть бути представленими єдиним співвідношенням:

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} - \delta} \quad (38.12)$$

Для розподілу Максвелла\_Больцмана  $\delta = 0$ ,  $\mu = 0$ ; для розподілу Бозе-Ейнштейна  $\delta = -1$ ; для розподілу Фермі-Дірака  $\delta = +1$ .

У якості прикладу використання можливостей квантової статистики розглянемо вивід формули Планка для теплового випромінювання [див. розділ VII, п. 29.3, співвідношення (29.25)].

Рівноважне теплове випромінювання в порожнині об'ємом  $V$ , за постійної температури  $T$ , можна розглядати як ідеальний бозе-газ фотонів (спін фотону  $\hbar$ ). Кількість фотонів з інтервалу довжин хвиль  $(\lambda+d\lambda)$  в об'ємі

випромінювання  $V$  зважаючи на два можливих напрямки поляризації фотонів  $dN(\lambda) = 2g(\lambda)f(\lambda)d\lambda$ , де  $g(\lambda) = g(p)\frac{dp}{d\lambda}$ ;  $g(p) = \frac{4\pi p^2}{h^3}V$  [див. співвідношення (38.5)] - густина квантових станів фотонів досліджуваного інтервалу довжин хвиль;  $p = \frac{h}{\lambda}$  - імпульс фотону;  $\frac{dp}{d\lambda} = -\frac{h}{\lambda^2}$ ;

$f(\lambda) = \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT} - 1\right)}$  - функція заповнення станів фотонами. Тобто

$$dN(\lambda) = \frac{8\pi V}{\lambda^4} \frac{d\lambda}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT} - 1\right)}. \quad \text{Енергія кожного з фотонів досліджуваного}$$

інтервалу  $\varepsilon = \frac{hc}{\lambda}$ , тому спектральна густина об'ємної густини енергії фотонів рівноважного випромінювання в порожнині чорного тіла:

$$\rho^*(\lambda, T) = \frac{dE(\lambda)}{Vd\lambda} = \frac{dN(\lambda)hc}{\lambda Vd\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT} - 1\right)}. \quad (38.13)$$

Отримана величина зв'язана з спектральною густиною енергетичної світності [див. формулу (28.3)] співвідношенням:  $r(\lambda, T) = \frac{c}{4}r(\lambda, T)$ , тому

$$r^*(\lambda, T) = \frac{c}{4}\rho^*(\lambda, T) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT} - 1\right)}, \quad (38.14)$$

що в точності співпадає з формулою Планка (29.25).

### 39 Теплоємність твердих тіл

1 Проблеми класичної теорії теплоємності твердих тіл. Закон Дюлонга-Пті. Теорія теплоємності кристалів Ейнштейна.

2 Теорія теплоємності кристалів за Дебаєм.

3 Динаміка руху електронів в кристалі. Особливості функції розподілу Фермі-Дірака.

1 Проблеми класичної теорії теплоємності твердих тіл. Закон Дюлонга-Пті. Теорія теплоємності кристалів Ейнштейна

Елементи класичної теорії теплоємності термодинамічних систем розглянуто в розділі II, п. 7.2. Класична теорія теплоємності базується на принципі Больцмана (теоремі про рівномірний розподіл енергії за ступенями свободи). Якщо примінити цей принцип до твердого тіла, що має 6 ступенів свободи, то молярна теплоємність твердого тіла  $C_M^{(v)} = 3R$ , де  $R$  -

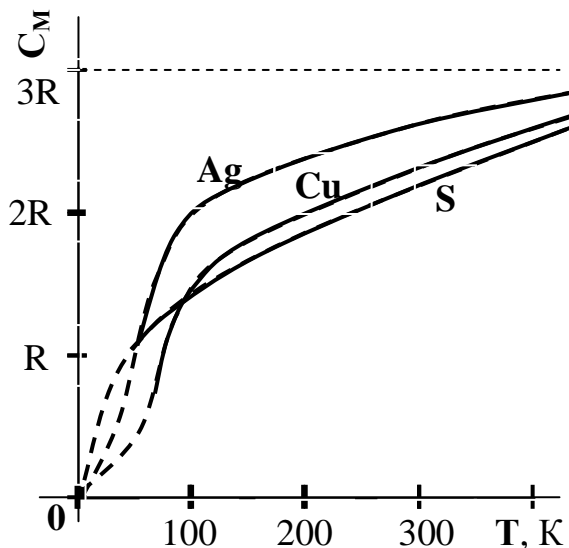


Рисунок 39.1

універсальна газова стала. Такий висновок повністю відповідає дослідно встановленому **закону Дюлонга-Пті**, який стверджує, що молярна теплоємність всіх хімічно простих кристалічних твердих тіл однакова і дорівнює

$$C_M = 3R. \quad (39.1)$$

Але цей закон, як на те вказує досвід, справедливий тільки для не дуже низьких температур. В межах низьких температур спостерігається різке розходження експериментальних результатів з законом Дюлонга-Пті (рис. 39.1) і в області низьких

температур має місце так званий **закон кубів Дебая**:

$$C_M = VT^3, \quad (39.2)$$

де  $V$  деяка константа. Область перехідних температур від поміркованих до низьких має досить складну температурну залежність молярної теплоємності (див. рис. 29.1).

Більше того, в металічних кристалах електрони провідності, за класичними уявленнями, розглядаються як ідеальний одноатомний газ, що знаходиться в стані теплової рівноваги з кристалічними ґратками. Відповідно до принципу Больцмана, електронний газ повинен мати молярну теплоємність  $C_M^{(el)} = \frac{3}{2}R$  і, таким чином, теплоємність металічних кристалів

повинна бути  $C_M^{(v)} = \frac{9}{2}R = 4,5R$ , тобто в 1,5 рази більшою за теплоємність

діелектричних кристалів, навіть в межах високих температур. Але досвід вчить, як це видно з рис. 39.1, що теплоємність електронного газу практично не виявляється - закон Дюлонга-Пті має місце і для діелектриків і для металів. Тобто класична теорія не в змозі пояснити особливості теплоємності ні кристалів ні електронів провідності в металах. Причина полягає в неправомірності використання закону про рівномірний розподіл енергії за ступенями свободи в межах низьких температур, де середню енергію коливання частинок необхідно обчислювати за законами квантової механіки (див., наприклад, п. 32.2).

Перша теорія теплоємності кристалів, що виходить з квантових властивостей теплових коливань в кристалах побудована А. Ейнштейном. Кристал з  $N$  атомів в цій теорії розглядається як система квантових осциляторів (див. п. 32.2), кожен з яких налаштований на одну і ту ж частоту. Середня енергія, що приходить на одну ступінь свободи осцилятора, обраховується за законами статистики і дорівнює:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{h\nu}{2} + \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (39.3)$$

що з точністю до адитивної константи співпадає з виразом середнього значення енергії осцилятора за формулою Планка [див. формули (29.22) та (29.25)]. Внутрішня енергія моля кристалу, що складається з тривимірних осциляторів, дорівнює:

$$U = 3N_A \langle \varepsilon \rangle = 3N_A \frac{h\nu}{2} + 3N_A \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (39.4)$$

звідки молярна теплоємність кристалу:

$$C_M = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3R \left( \frac{h\nu}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left( e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)^2}. \quad (39.5)$$

З умови  $\frac{h\nu}{kT_E} = 1$  вводиться характеристична температура (температура Ейнштейна):

$$T_E = \frac{h\nu}{k} = \frac{\hbar\omega}{k}, \quad (39.6)$$

Де  $\omega = 2\pi\nu$  - частота, на яку налаштовані осцилятори. Формула (39.5) приймає вигляд:

$$C_M = 3R \left( \frac{T_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{T_E}{T}}}{\left( e^{\frac{T_E}{T}} - 1 \right)^2}. \quad (39.7)$$

За умови високих температур  $h\nu \ll kT$  і  $e^{\frac{h\nu}{kT}} \approx 1$ ,  $e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx 1 + \frac{h\nu}{kT} - 1 = \frac{h\nu}{kT}$ .

Тому  $C_M = 3R$ , що повністю відповідає закону Дюлонга-Пті (рівняння 39.1).

За низьких температур  $h\nu \gg kT$  і  $e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \approx e^{\frac{h\nu}{kT}}$ . Тому

$$C_M = 3R \left( \frac{T_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{T_E}{T}}, \quad (39.8)$$

що тільки якісно вказує на зменшення теплоємності твердих тіл із зниженням температури в області низьких температур, але кількісно відрізняється від закону Дебая (39.2).

## 2 Теорія теплоємності кристалів за Дебаєм

Сучасною теорією теплоємності кристалів є теорія Дебая. Вважається, що в кристалі можуть виникати коливання широкого діапазону, який поділяється, за методами генерування на оптичний та звуковий. Теорія Дебая виходить з того, що теплоємність кристалів обумовлена коливаннями тільки звукового діапазону. При цьому в кристалі можуть виникати коливання тільки таких частот. Для яких можливо розповсюдження відповідних хвиль в кристалі. За першого наближення вважаємо, що в кристалах розповсюджуються повздовжні та поперечні хвилі двох різних поляризацій з однаковою швидкістю  $U$  – всього три хвильові процеси даної частоти  $\omega$ . Тим саме визначається діапазон можливих для даного кристалу з лінійним

розміром  $L$  та з параметром ячейки  $a \approx \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}$ , де  $V$  об'єм кристалу, а  $N$  –

загальна кількість атомів в ньому. Врахування статистичного розподілу за відстанями між вузлами кристалічної ґратки дає для середнього значення

параметру ячейки результат:  $a \approx \left(\frac{\pi^2 V}{3N}\right)^{1/3}$ .

В такому кристалі можуть виникати хвилі, що розповсюджуються із швидкістю  $U$ , з довжинами  $2a \leq \lambda \leq 2L$ . Відповідні коливання обмежуються частотами: зверху частотою

$$\omega_{\max} = \frac{2\pi U}{2a} = U \left(\frac{3\pi N}{V}\right) \text{ та частотою } \omega_{\min} = \frac{2\pi U}{2L} \rightarrow 0. \text{ знизу,} \quad (39.9)$$

зважаючи на те, що лінійні розміри кристалу, порівняно з розмірами ячейки, можна вважати нескінченно великими:  $L \rightarrow \infty$ .

Для обчислення молярної теплоємності кристалу  $C_M^V = \left(\frac{\partial Q}{\partial T}\right)_V = \frac{\partial U}{\partial T}$

достатньо визначити енергію коливань одного молю вузлів кристалу - за постійного об'єму кількість підведеної до термодинамічної системи теплоти дорівнює збільшенню її внутрішньої енергії:  $Q = \Delta U$  (див. п. II. 7.2). З цією метою можна скористатися висновками статистичної теорії, розглядаючи кристал у вигляді куба, в якому існують хвилі та коливання частотного діапазону ( $0 \leq \omega \leq \omega_{\max}$ ).

За аналогією з теорією теплового випромінювання (див. п. 38.2), вважається, що звукові хвилі мають квантову природу і являють собою потік часток, квантів звукових хвиль, що мають назву «фононів». Фонони мають

енергію  $\varepsilon = \hbar\omega$ , та квазіімпульс  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ ;  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ;  $p = \frac{\hbar\omega}{U}$ . На відміну від фотонів, фонони є квазічастками тому, що можуть передавати свій імпульс вузлам кристалічних ґраток частинами. Момент імпульсу (спін) фононів дорівнює нулю, тому фонони є бозонами і підкоряються закону розподілу (38.8). Кількість фононів не фіксована, тому їх хімічний потенціал  $\mu = 0$ .

Енергія  $dN$  фононів частотного діапазону  $(\omega + d\omega)$

$$dU = dN \hbar\omega = g(\omega)f(\omega)\hbar\omega d\omega; dN = g(\omega)f(\omega)d\omega, \quad (39.10)$$

де густина рівнів з частотами вказаного діапазону [див. співвідношення

(38.5)]  $g(\omega) = g(p)\frac{dp}{d\omega} = \frac{\omega^2 V}{\pi U^3}$ . Зважаючи на те, що в кристалі можуть розповсюджуватись повздовжні та поперечні двох напрямків поляризації хвилі, маємо:

$$g(\omega) = 3 \frac{\omega^2 V}{\pi U^3}. \quad (39.11)$$

Таким чином,  $dU = 3 \frac{\omega^2 V}{\pi U^3} \frac{\hbar\omega d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$ , а повна енергія

$$U = \int_0^{\omega_{\max}} 3 \frac{V}{\pi U^3} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega. \quad (39.12)$$

Інтеграл (39.12) має складну форму і може бути обчисленим в кінцевих аналітичних виразах для граничних випадків високих та низьких температур. Для цього вводиться характеристична температура Дебая із співвідношення

$$\frac{\hbar\omega}{kT_D} = 1 \Rightarrow T_D = \frac{\hbar\omega}{k}.$$

Для **високих температур**  $T \gg T_D$   $\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1 \Rightarrow e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \approx \frac{\hbar\omega}{kT}$ . Тому

$U = 3 \frac{\hbar V}{\pi U^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega^3 d\omega}{\hbar\omega} kT = 3 \frac{V}{\pi U^3} \frac{\omega_{\max}}{3}$ , або, після підстановки значення  $\omega_{\max}$  із співвідношень (39.9), маємо для енергії одного моля:

$$U_M = \frac{V}{\pi U^3} \frac{3\pi N_A kT}{V} = 3kN_A T = 3RT, \quad (39.13)$$

що для теплоємності за високих температур приводить до закону Дюлонга-Пті (39.1):

$$C_M^{(V)} = \frac{\partial U_M}{\partial T} = 3R. \quad (39.14)$$

В межах **низьких температур**, де  $T \ll T_D$ , маємо  $\frac{\hbar\omega}{kT} \gg 1 \Rightarrow e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \approx e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}$  та  $\omega_{max}$  можна вважати нескінченно великою:

$\omega_{max} \rightarrow \infty$ . Тому  $U = 3 \frac{\hbar V}{\pi U^3} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}} kT$ . Для обчислення даного інтегралу

зробимо заміну змінних:  $\frac{\hbar\omega}{kT} = x \Rightarrow \omega = \frac{kT}{\hbar} x; d\omega = \frac{kT}{\hbar} dx$ . Відповідно

$$U = 3 \frac{\hbar V}{\pi U^3} \frac{k^4}{\hbar^4} T^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^3 k^4 V}{5 U^3 \hbar^3} T^4, \text{ де } \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}. \text{ Таким чином}$$

$$C_M^{(V)} = \frac{\partial U_M}{\partial T} = \frac{4\pi^3 k^4 V_M}{5 U^3 \hbar^3} T^3 = BT^3, \quad (39.15)$$

що повністю узгоджується з законом кубів Дебая (39.2).

#### **40 Елементи зонної теорії твердого тіла**

1 *Загальні поняття про енергетичні зони в кристалах та основні висновки зонної теорії.*

2 *Динаміка руху електронів в кристалах та особливості функції розподілу Фермі-Дірака.*

3 *Класифікація твердих тіл за електропровідністю.*

1 *Загальні поняття про енергетичні зони в кристалах та основні висновки зонної теорії.*

*Загальні поняття про зонну структуру.* Зонна структура кристалів (твердих тіл) є основою більшості сучасних уявлень про механізми різних явищ у діелектриках, напівпровідниках і провідниках (металах). Загалом ці уявлення зводяться до того, що електрон у твердому тілі має дозволені значення енергії у визначених інтервалах ( $E_{i\ max}$ ,  $E_{i\ min}$ ), розділених значень енергії, що електрон не може мати в кристалі (заборонених значень енергії). Інтервали дозволених значень зветься *дозволеними зонами*, інтервали енергій, що не здійснюються в кристалах, зветься *забороненими зонами*. Число можливих станів у дозволених зонах кінцеве, що в силу принципу заборони Паулі приводить до кінцевого числа електронів, що мають енергією в даній зоні. Перехід електрона із зони в зону зв'язаний зі зміною енергії не менше ширини забороненої зони. Такий перехід може здійснюватися за рахунок енергії теплових коливань ґратки, освітлення, електричних полів.

Зонну структуру кристалів підтверджує і досвід. Наприклад, спектри поглинання твердих тіл в оптичній ділянці й в ділянці м'яких рентгенівських променів складаються з окремих широких смуг. Це говорить про те, що

електрони твердого тіла можуть поглинати тільки таку енергію, що не менше ширини забороненої зони:  $h\nu = E_{n+1 \min} - E_{n \max}$ , і не більше відстані між дном однієї зони і стелею іншої, більш високої зони.

Теоретично зонна структура кристалів виходить із розв'язання рівняння Шредінгера для кристала. Однак це рівняння повинне містити  $3(Z+1)N$  координат часток, де  $Z$  – число електронів в атомі, а  $N$  – загальне число атомів у кристалі. Рівняння, що містить таку велику кількість змінних, не може бути розв'язане точно і розв'язується наближеними методами зведення до вивчення руху одного електрона в так званому самоузгодженому полі шляхом ряду більш-менш природних припущень. Заміна реального кулонівського поля деяким самоузгодженим полем є найбільш слабким пунктом теорії, тому що це поле не може бути обчислене теоретично. Однак у даний час це єдино можливий шлях для вирішення задачі дослідження кристала. При цьому хвильова функція і величина енергії довільного електрона знаходиться з розв'язання рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(r) + V(r)\psi(r) = E \psi(r), \quad (40.1)$$

де  $V(r)$  – самоузгоджене поле кристала разом з іншими електронами. Найзагальнішим припущенням про особливості цього поля є припущення про його періодичність з періодом ґраток кристала.

У результаті розв'язання рівняння (40.1) отримані висновки, на основі яких побудована теорія, відома як *зонна теорія твердих тіл*.

### Основні висновки зонної теорії кристалів

1 Спектр енергій електрона в кристалі складається з послідовності зон дозволених значень енергії, розділених зонами заборонених для електрона в кристалі значень енергії.

2 Ширина зони визначається ділянкою перекриття електронних хмар двох сусідніх атомів і не залежить від розмірів кристала (числа атомів у ньому). На рис. 40.1 зображене утворення зон при зближенні атомів натрію,  $r_0$  відповідає постійній ґраток натрію.

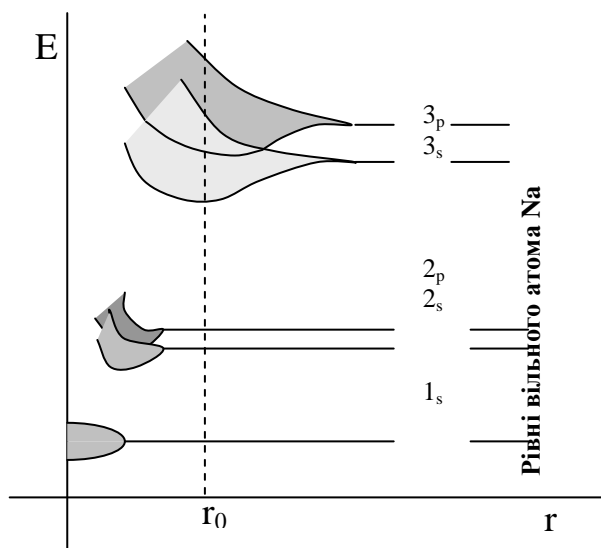


Рисунок 40.1

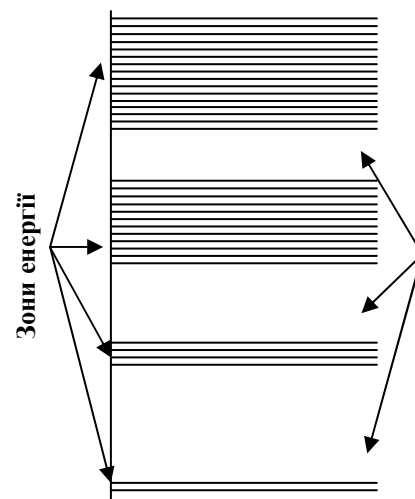


Рисунок 40.2

3 Для кристала кінцевих розмірів, що містить  $N$  атомів, зона складається з  $N$  підрівнів. Відстань між підрівнями обернено пропорційна числу атомів у кристалі. При загальній ширині зони порядку 1 еВ і числі атомів кристала  $10^{29} \text{ м}^{-3}$  відстані між підрівнями порядку  $10^{-29}$  еВ.

4 З ростом енергії ширина дозволених зон збільшується, а ширина заборонених зон зменшується (рис. 40.2). Це зв'язано з тим, що з ростом головного квантового числа росте енергія електрона і збільшуються розміри електронних хмар, а разом з тим збільшується ступінь їхнього перекриття і величина обмінних сил. Зменшення ширини заборонених зон зв'язано також зі зменшенням відстаней між атомними рівнями енергій.

5 Зміна відстаней між атомами приводить до зміни ширини зон.

6 Для розуміння більшості електричних і оптичних властивостей напівпровідників досить розглянути верхню заповнену (валентну), першу вільну зони й інтервал між ними (заборонену зону).

Стани електронів у зонах повинні підкорятися принципу Паулі. При цьому в стані  $nl$ , де  $n$  - головне, а  $l$  – орбітальне квантові числа, до утворення кристала знаходилися  $2N(2l+1)$  електронів ( $N$  – число атомів утворюючих кристал). Але в кристалі, як в атомній структурі, що підкоряється принципу Паулі, таких станів повинно бути в  $N$  разів більше. З цієї причини стани електронів у кристалі не можуть характеризуватися четвіркою квантових чисел  $n, l, m_l, m_s$  як у вільному атомі і використовуються, наприклад, три проекції хвильового вектора (квазіімпульсу)  $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$  і  $m_s$  – магнітне спінове число. У такому випадку *принцип Паулі* стверджує: у стані  $(k_x, k_y, k_z, m_s)$  може бути не більш одного електрона і *на будь-якому енергетичному рівні зони в кристалі може знаходитися не більш двох електронів (з антипаралельними спінами)*.

Наприклад, в атомі літію електрони знаходяться в станах  $1s_2 2s_1$  і зони, що утворилися в кристалі літію, відповідно містять по  $2N$  рівнів ( $l = 0$ ). При цьому внутрішня зона заповнена цілком, а валентна зона заповнена тільки на половину.

## 2 Динаміка руху електронів в кристалі. Особливості функції розподілу Фермі-Дірака.

Електричні властивості кристалів визначаються особливістю взаємодії електронів кристала з зовнішніми електричними полями і з внутрішніми полями кристала. Прийнято внутрішні поля кристалів враховувати в характері руху електрона і розглядати його як вільну квазічастинку – електрон, але з масою, що залежить від його положення усередині зони, так званою ефективною масою. До розуміння такого підходу можна підійти з наступних міркувань.

Електрон у кристалі представляється групою хвиль де Бройля (не змішувати із звуковими хвилями, про які йшлося вище) частотного діапазону

$(\omega, \omega \pm \Delta\omega)$  з хвильовими числами  $(k, k \pm \Delta k)$  й енергією  $E = \hbar\omega$ . Швидкість його переміщення є груповою швидкістю:

$$U = U_{gp} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (40.2)$$

Зміна енергії електрона здійснюється за рахунок сили зовнішнього електричного поля  $\vec{F} = e\vec{E}$ , яка надає електрону, що рухається зі швидкістю  $U$ , прискорення:

$$a = \frac{dU}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \frac{dE}{dt}. \quad (40.3)$$

З огляду на те, що потужність  $N = \frac{dE}{dt} = FU$ , тобто, що це потужність, яка розвивається зовнішніми силами, перепишемо рівність (40.3):

$$a = F \frac{1}{\hbar} \frac{dU}{dk} = F \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (40.4)$$

Рівність (40.4) формально можна сприймати як запис другого закону Ньютона для руху електрона в кристалі під дією зовнішнього електричного поля, якщо позначити

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{1}{m^*} \quad \text{і} \quad m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (40.5)$$

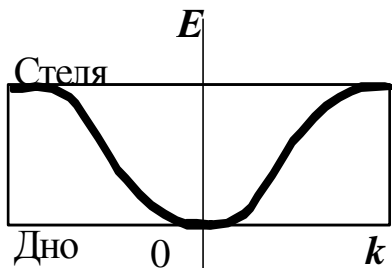


Рисунок 40.3

вважати ефективною масою електрона як вільної квазічастинки із змінною масою, що рухається в зовнішніх полях. Величина і знак ефективної маси залежить від виду функціональної залежності  $E=E(k)$ . Хід залежності  $E=E(k)$  для електрона в дозволений зоні визначається з розв'язання рівняння Шредінгера (40.1) і її типова форма приведена на рис. 40.3.

Поблизу дна зони електрон поводить

як звичайна частка:  $\frac{d^2 E}{dk^2} > 0$  (мінімум функції) і його ефективна маса залежить від ширини зони, тобто від ступеня перекриття електронних хмар: чим менше перекриття, чим слабкіше зв'язок між атомами, тим важче за допомогою зовнішнього електричного поля прискорювати електрони, тим вони «вагоміші».

У стелі зони (див. рис. 40.3)  $\frac{d^2 E}{dk^2} < 0$  і електрон поводиться аномально, – він рухається проти сил поля, поводиться як позитивно заряджена частка («дірка»).

Розподіл електронів по енергетичних рівнях у зонах підкоряється квантовій статистиці Фермі-Дірака (див. п 38).

В основі статистики Фермі-Дірака для електронів лежать такі основні положення.

- 1 Всі електрони системи однакові, нерозпізнавані.
- 2 Стани електронів визначаються четвіркою квантових чисел (див. вище п. 40.1), а зміна хоча б одного з них веде до зміни стану.
- 3 У системі не може бути одночасно більш одного електрона в даному квантовому стані.

Через ці особливості і дискретність енергетичних рівнів, для визначення характеру розподілу електронів у зоні необхідно установити, як розподілені квантові рівні енергії в зоні – густина енергетичних рівнів  $g(E)$  і яка імовірність заповнення електронами кожного з рівнів  $f(E)$ . У такому випадку число електронів, що володіють енергіями в інтервалі  $(E, E+dE)$ ,

$$dN(E) = f(E)g(E)dE. \quad (40.6)$$

Густина станів, тобто число станів в одиниці об'єму, що приходяться на одиничний інтервал енергії, визначається співвідношенням (див п. 38.1):

$$g(E) = \frac{4\pi m^{3/2} V}{h^3} \sqrt{E}, \quad (40.7)$$

тобто густина станів росте з ростом енергії пропорційно  $\sqrt{E}$ , як це показано на рис. 40.4.

Імовірність заповнення станів електронами  $f(E)$  визначає середнє число електронів у даному стані, воно було отримано Фермі після врахування хвильових властивостей електронів (див п.38.1):

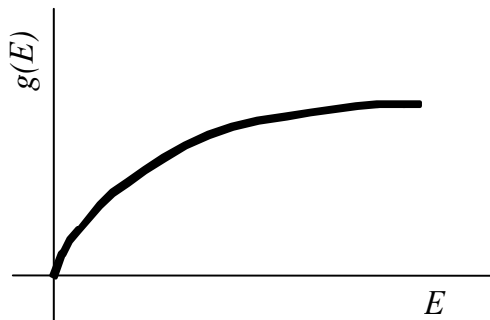


Рисунок 40.4

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}. \quad (40.8)$$

У виразі (40.8)  $E_F$  представляє енергію (або рівень) Фермі. Енергія Фермі визначається в основному концентрацією електронів і трохи залежить від температури. Особливості функції Фермі (40.8) при нулю абсолютної температури і при температурах відмінних від нуля представлені на рис 40.5.

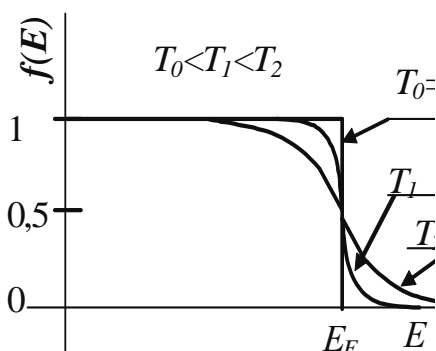


Рисунок 40.5

Властивості розподілу Фермі:

а)  $T = 0$  К. При температурі 0 К якщо  $E < E_F$ , то  $f = 1$ , і якщо  $E > E_F$  -  $f = 0$ , тобто всі стани з  $E < E_F$  зайняті

електронами, а всі стани з  $E > E_F$  вільні. Таким чином, енергія Фермі чисельно дорівнює максимальній енергії, що можуть мати електрони при 0 K;

b)  $T > 0$  K. Для  $E \ll E_F$   $f$  близька до одиниці і  $f$  близька до нуля для  $E \gg E_F$ . Для  $E = E_F$  функція Фермі  $f = 1/2$ ;

c)  $T > 0$  K і  $E \gg E_F$ . Тому що в цих умовах  $e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} \gg 1$ , то

$$f(E) \approx e^{-\frac{(E-E_F)}{kT}} = e^{\frac{E_F}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} = A e^{-\frac{E}{kT}}, \quad (40.9)$$

що збігається з класичним розподілом Больцмана для часток у рівноважній термодинамічній системі. За прийнятою термінологією, частки, що підкоряються статистиці Фермі, називаються *ферміонами*, газ таких часток називається *виродженням*. Отже, при умовах, розглянутих у п. c), *виродження знімається*: газ стає не квантовим, а класичним. Тут можна відзначити, що газ електронів і дірок у напівпровідниках при кімнатних температурах, де концентрації цих носіїв не високі, є класичним газом, тобто, підкоряється розподілу Больцмана.

З врахуванням виразів (40.7) і (40.8) розподіл електронів (40.6) приймає форму, графік якої представлений на рис.

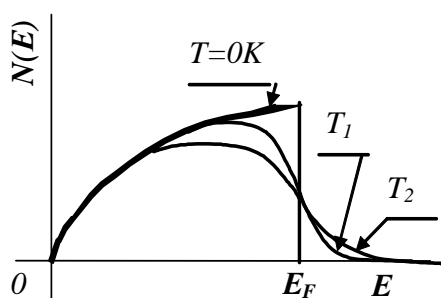


Рисунок 40.6

40.6, де графіки представлені для температур  $0 < T_1 < T_2$ . Зверніть увагу на те, що для малих значень енергії дозволені рівні заповнені, а, починаючи з деяких енергій, рівні заповнені лише наполовину і для високих енергій вони вільні, як це виходить з графіка рис. 40.6.

### 3 Класифікація твердих тіл по електропровідності

За своїми електричними властивостями тверді тіла поділяються на провідники (метали), напівпровідники, і діелектрики (ізолятори).

До *провідників* відноситься клас речовин, що мають у своєму складі електричні заряди, розташовані на мікроносіях (електрони, іони) і які можуть переміщатися навіть під дією слабких електричних полів. З точки зору зонної теорії до провідників (металів) відносяться речовини, що мають або не цілком заповнену енергетичну зону, або цілком заповнену і вільну зони, які частково перекриваються, що в кінцевому рахунку приводить до не цілком заповненої зони (рис. 40.7, а). У такому випадку при накладанні зовнішнього електричного поля електрони можуть переходити на більш високі енергетичні рівні в зоні, унаслідок чого вони здобувають швидкість напрямленого руху, беручи участь в електричному струмі.

До діелектриків (ізоляторів) відносяться речовини, що не проводять електричний струм. З точки зору зонної теорії це речовини, у яких заповнені всі стани енергетичних зон аж до валентної зони, а перша вільна зона знаходиться на відстані не менш 2...3 еВ (рис.40.7, в).

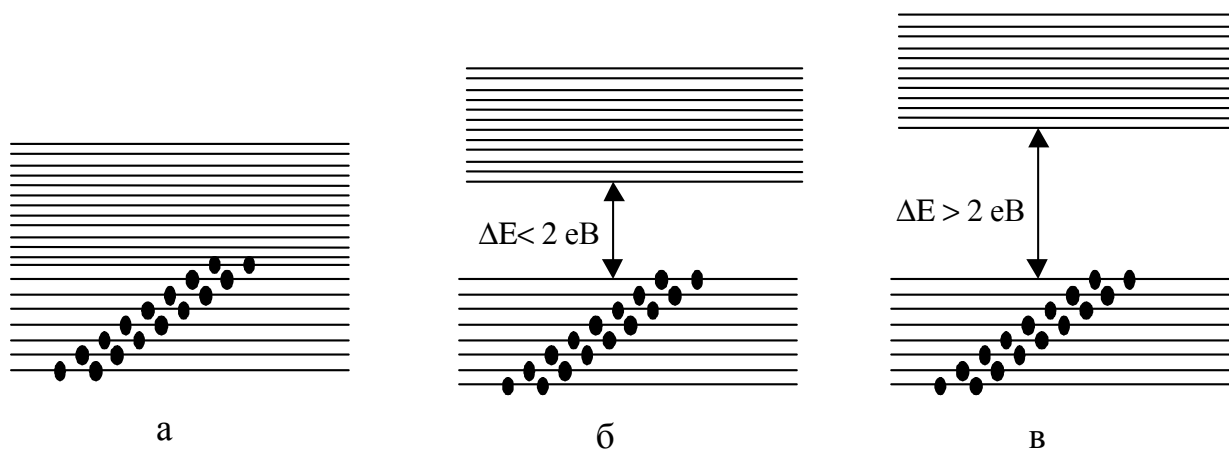


Рисунок 40.7

До напівпровідників відносяться речовини, що за властивостями провідності займають проміжне положення між провідниками і діелектриками. Крім того, їхня електропровідність збільшується зі збільшенням освітленості, під впливом електричних полів і механічних напруг; особливо різко їхня електропровідність залежить від домішок.

З точки зору зонної теорії напівпровідниками є речовини, що мають цілком заповнені зони, у тому числі і валентну зону, а найближча незаповнена зона – зона провідності відстоїть на відстані не більш 2...3 еВ (рис.40.7, б). У цьому випадку при 0 К всі енергетичні рівні зайняті, а переходи між рівнями заборонені принципом Паулі, такі переходи не супроводжуються зміною макростану кристала і не можуть брати участь в обміні енергією із зовнішнім електричним полем, тобто вони не можуть рухатись під дією зовнішнього електричного поля. Для того, щоб електрони напівпровідника могли приймати енергію зовнішнього електричного поля і створювати тим самим електричний струм, необхідно частину електронів перевести через заборонену зону в зону провідності. Тим самим у валентній зоні з'являться вільні місця на дозволених енергетичних рівнях - «дірки» і електрони в зоні провідності, які мають можливість приймати енергію зовнішнього електричного поля. Місце «дірок» також може займатися електронами більш глибоких енергетичних рівнів і в такий спосіб під дією зовнішнього електричного поля може здійснюватися напрямлений рух електронів і в зоні провідності й у валентній зоні – створюється електричний струм. Для перекидання електронів у зону провідності і буде потрібна енергія тих впливів, про які було сказано вище.

Розподіл речовин на напівпровідники і ізолятори умовний. Гарним ізолятором є алмаз із шириною забороненої зони 5,6 еВ, а гарний напівпровідник германій має ширину забороненої зони менш 1 еВ.

## 41 Напівпровідники та їх електричні властивості

- 1 Електричні властивості напівпровідників.
- 2 Електрична провідність власних напівпровідників.
- 3 Електрична провідність домішкових напівпровідників.
- 4 Контактні явища в напівпровідниках. Властивості p-n-переходу.

### 1 Електричні властивості напівпровідників

Найважливішою властивістю напівпровідників (див. п. 40.3) є залежність їхніх електричних властивостей від таких зовнішніх факторів як температура, освітленість, тиск, електричні і магнітні поля. Формальною, але не вирішальною, ознакою приналежності речовини до напівпровідників є величина електропровідності, що для них може приймати значення в межах  $\sigma=10^6\dots10^{-8}\text{ Ом}^{-1}\text{ м}^{-1}$ . Для металів  $\sigma \sim 10^8\dots10^5\text{ Ом}^{-1}\text{ м}^{-1}$ . Для ізоляторів  $\sigma < 10^{-12}\text{ Ом}^{-1}\text{ м}^{-1}$ .

Характерною є температурна залежність електричних властивостей напівпровідників. На відміну від металів зі збільшенням температури, опір напівпровідників падає. Досвід дає залежність опору напівпровідників від температури у вигляді

$$R = R_0 e^{-\frac{E_a}{kT}}, \quad (41.1)$$

де  $E_a$  – енергія активації, величина характерна для напівпровідників різного типу.

У деякій ділянці температур опір напівпровідників може зростати з ростом температури. Такі напівпровідники називаються *виродженими*.

За *типами носіїв струму* напівпровідникові речовини поділяються на іонні й електронні. В іонних напівпровідниках носіями струму є іони ґраток, а в електронних – електрони і дірки. Іонні напівпровідники не знаходять застосування в стаціонарних приладах, оскільки проходження через них струму супроводжується переносом речовини і руйнуванням напівпровідника. Практичне значення мають електронні напівпровідники. Різка залежність опору цих напівпровідників від температури й освітленості дає можливість використовувати їх в якості перетворювачів відповідних сигналів в електричні. Прилади при цьому називаються *терморезисторами, фоторезисторами та ін.*

До класу напівпровідників відноситься більшість речовин. До них належать чисті елементи В, С, Si, Р, S, Ge, As, Se, Sn, Sb, Те, J. Ці елементи являють собою компакту групу в таблиці елементів. У табл. 41.1 вони виділені жирною лінією. Поруч із символом елемента зазначена ширина забороненої зони в електрон-вольтах. Вона росте по групах зліва направо, по періодах – знизу вгору. Напівпровідниками є також різні сполуки, наприклад, сполуки типу  $A^I B^{VII}$  (CuCl, AgBr, ...);  $A^{IV} B^I$  (Si, GeSi);  $A^I B^{VI}$  (Cu, Cu, Cu<sub>2</sub>O,...) і ін.

Таблиця 41.1

Періоди \ групи	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
II	Be	B 1,1	C 5,2	N	O		
III		Al	Si 1,1	P 1,5	S 2,5	Cl	
IV			Ge 0,75	As 1,2	Se 1,7	Br	
V			Sn 0,08	Sb 0,12	Te 0,36	I 1,25	Xe
VI			Pb	Bi	Po	At	

*Власні і домішкові напівпровідники.* Напівпровідники, провідність яких обумовлена переходами електронів із заповненої валентної зони в зону провідності, називаються *власними*. Напівпровідники, провідність яких обумовлена іонізацією домішки, називаються *домішковими*. *Домішкові напівпровідники* у свою чергу поділяються на *електронні* і *діркові* напівпровідники. В електронних напівпровідниках основними носіями струму є електрони, що виникають при іонізації атомів домішки. Такі домішки називаються *донорними*, або *донорами*. У дірковому напівпровіднику основними носіями струму є дірки (див. п. 40.3). Дірки виникають у валентній зоні при переходах електронів цієї зони на домішкові рівні. Такі домішки називаються *акцепторними*, або *акцепторами* (приймаючими).

## 2 Електрична провідність власних напівпровідників

*Механізм провідності власних напівпровідників* розглянемо на прикладі елемента четвертої групи, типового напівпровідника Ge. Атоми чотиривалентного германія утворюють кубічні ґратки, у яких кожен атом зв'язаний парноелектронним зв'язком з чотирма найближчими атомами. Двовимірний кристал з таким зв'язком при  $T=0\text{ K}$  приведена на рис. 41.1, а.

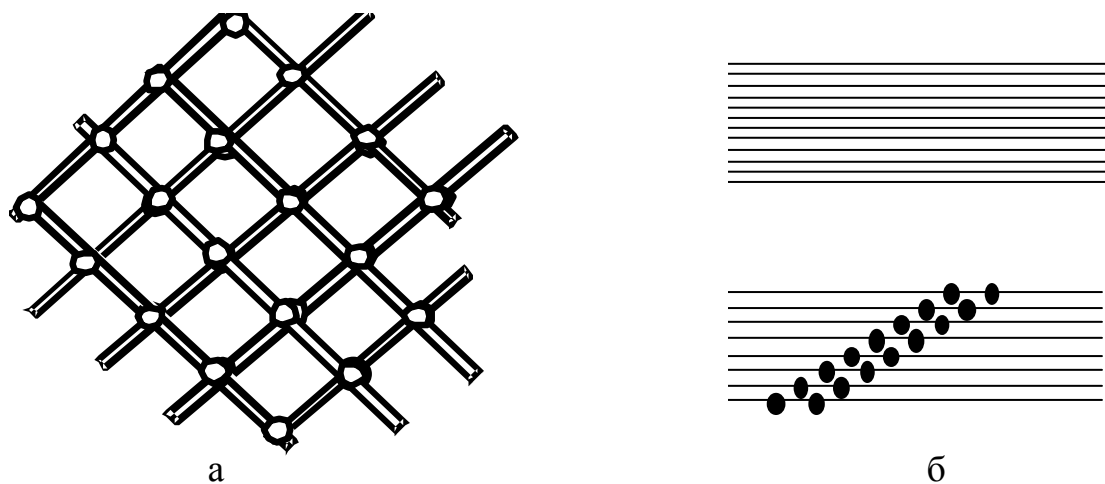


Рисунок 41.1

Валентні електрони належать своїм атомам і, крім того, завдяки перекриттю електронних хмар, вони можуть переходити від атома до атома при зустрічному русі інших електронів, – атоми обмінюються електронами й електрони можуть переміщатися по всьому кристалу. Однак такий рух є чисто хаотичним і не може брати участь у спрямованому русі під дією зовнішнього електричного поля – струм у напівпровіднику відсутній. Для створення електричного струму валентні електрони необхідно відірвати від атомів, зробити їх вільними.

З точки зору зонної теорії струм у напівпровіднику при низьких температурах відсутній, тому що всі енергетичні рівні валентної зони зайняті і нікуди прийняти енергію такої взаємодії. Зонна структура напівпровідникового кристала при  $T = 0 \text{ K}$  представлена на рис. 41.1, б. Для переведення електронів у зону провідності енергії електричного поля недостатньо. Щоб електрон перейшов у зону провідності і став вільним, потрібна енергія порівнянна з внутрішньоатомною і із шириною забороненої зони. Такою енергією може бути енергія теплового руху з урахуванням розподілу електронів за енергіями (див. п. 40.2, рис 40.6), енергія фотонів чи інших енергійних часток. Такі електрони створюють звичайний електронний механізм провідності. Однак у власному напівпровіднику є й інший механізм створення електричного струму. Дійсно, у валентній зоні після відходу електрона з'явився вільний стан - дірка, що дозволяє електронам більш глибоких рівнів переміщатися, приймаючи, наприклад, енергію зовнішнього електричного поля, по полю. *Переміщення дірки* – це переміщення одного некомпенсованого позитивного заряду атомів. Тому рух дірки, обумовлений рухом сукупності електронів у протилежному напрямку, здійснює перенос позитивного заряду. Рух вільного стану в глиб валентної зони може розглядатися як рух деякої частки, що має позитивний заряд і деяку ефективну масу (див. п. 40.2). У власному напівпровіднику, отже, здійснюються електронний (негативний) і дірковий (позитивний) механізми провідності. Число електронів у зоні провідності завжди дорівнює числу дірок у валентній зоні у власному напівпровіднику.

*Розподіл електронів і дірок за підрівнями* розглянуто в п. 40.2. У формуванні електричних властивостей напівпровідника важливу роль грають електрони і дірки поблизу границь зон: електрони біля дна зони провідності, а дірки поблизу стелі валентної зони. Залежність енергії часток від квазіімпульсу для цих ділянок має форму звичайної параболи (див. рис. 40.2), а тому густина станів визначається співвідношеннями, аналогічними співвідношенню (40.7) з тією різницею, що енергію необхідно відрахувати від границь зон (рис. 41.2):

$$g_c(E) = 4\pi \left( \frac{m}{h^2} \right)^{3/2} V (E - E_c)^{1/2} \quad (41.2)$$

i

$$g_v(E) = 4\pi \left( \frac{m}{h^2} \right)^{3/2} V(E_v - E)^{1/2}, \quad (41.3)$$

де вираз (41.2) відноситься до зони провідності;  $E_c$  – енергія біля дна зони, а вираз (40.3) – до валентної зони;  $E_v$  – енергія поблизу стелі цієї зони.

Положення рівня Фермі в напівпровідниках визначається з умови електронейтральності, що дає умову  $N_p = N_n$ . Цей рівень повинний бути нижче  $E_c$  і вище  $E_v$ . Через малість концентрації електронів провідності і дірок у напівпровідниках ідеальний газ цих часток залишається невідродженим (див. текст наприкінці п. 40.2) і підкоряється класичній статистиці Больцмана [див. формулу (40.9)]:

$$N_n = A_n e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}}; N_p = A_p e^{-\frac{E_F - E_v}{kT}} \quad \text{і} \quad A_n e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} = A_p e^{-\frac{E_F - E_v}{kT}}, \quad (41.4)$$

де  $A_n$  і  $A_p$  – відповідні постійні, одержувані з умови нормування. З умови (41.4) випливає, що

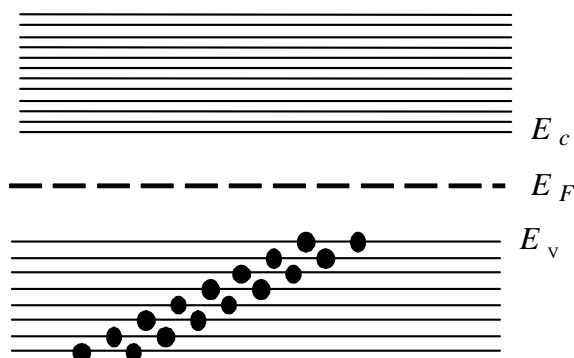


Рисунок 41.2

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln \frac{A_n}{A_p}. \quad (41.5)$$

При температурі  $T = 0 \text{ K}$

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} \quad \text{і} \quad \text{знаходиться точно}$$

посередині забороненої зони (рис. 41.2) і з ростом температури рівень Фермі підвищується.

З врахуванням того, що ширина забороненої зони

$\Delta E = E_c - E_v$  маємо:

$$\Delta E = 2(E_c - E_F) = 2(E_F - E_v) \quad (41.6)$$

В умовах, коли рівень Фермі знаходиться між дном зони провідності і стелею валентної зони, а розподіл електронів по дозволених рівнях переходить з розподілу Фермі в розподіл Больцмана, для електронів і дірок маємо відповідно:

$$f_n(E) = e^{-\frac{E - E_F}{kT}}; f_p(E) = e^{-\frac{E_F - E}{kT}}, \quad (41.7)$$

а кількість електронів у зоні провідності

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E) dE = \int_{E_c}^{\infty} 4\pi \left( \frac{m_n}{h^2} \right)^{3/2} V(E - E_c)^{1/2} e^{-\frac{E - E_F}{kT}} dE = 2 \left( \frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}};$$

з урахуванням співвідношення (41.6) одержимо

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} = N_c e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}. \quad (41.8)$$

Аналогічно для дірок у валентній зоні

$$p = N_v e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}. \quad (41.9)$$

У виразах (41.8) і (41.9)  $N_c$  і  $N_v$  константи, що при температурах  $T \rightarrow 0$  К практично рівні один одному і дорівнюють деякій константі  $N_0$ . Електропровідність напівпровідника в першому наближенні пропорційна числу вільних носіїв струму:

$$\sigma \sim n + p = 2 N_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}. \quad (41.10)$$

### 3 Провідність домішкових напівпровідників

*Механізм провідності електронних напівпровідників* розглянемо на прикладі елемента четвертої групи, типового напівпровідника *Ge* з донорною домішкою п'ятивалентного елемента. Атоми чотиривалентного германія утворюють кубічні ґратки, у якій кожен атом зв'язаний парноелектронним зв'язком з чотирма найближчими атомами. Якщо п'ятивалентний атом домішки, наприклад, фосфору або миш'яку чи сурми, заміщає в ґратках нормальний атом, то після утворення чотирьох ковалентних зв'язків з найближчими сусідами залишиться один валентний електрон, що буде локалізований поблизу атома домішки (рис. 41.3, а).

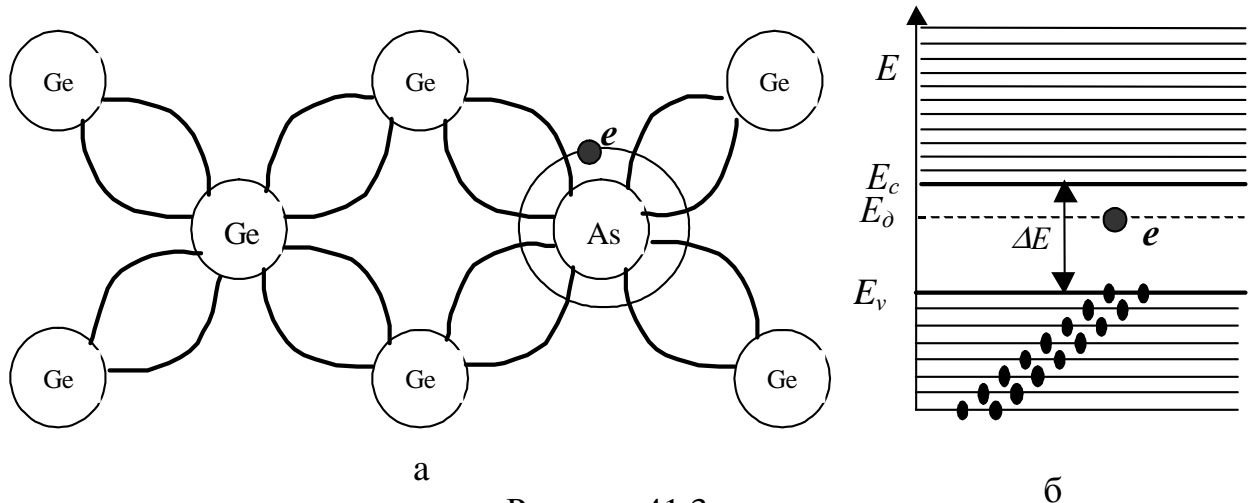


Рисунок 41.3

При цьому в енергетичному спектрі кристала біля дна зони провідності з'являється додатковий енергетичний рівень  $E_d$  домішкового атома, на якому знаходиться "зайвий" електрон (рис. 41.3, б).

Надлишковий електрон рухається в кулонівському полі домішкового атома. Якщо атом домішки одержує енергію  $E$  (наприклад, за рахунок теплових коливань ґратки), перевищуючу  $E_c - E_d$  - енергію іонізації домішки ( $E_c$  - енергія електрона біля дна зони провідності), то надлишковий електрон залишає атом домішки і стає носієм струму. На енергетичній діаграмі це відповідає переходу електрона з донорного рівня в зону провідності (див. рис. 41.3, б). Надлишковий електрон має тепер можливість обмінюватися

енергією із зовнішнім електричним полем, переміщаючись на більш високі вільні рівні в зоні провідності - стати електроном провідності. У цілому ж кристал залишається електронейтральним, оскільки електрон залишається в кристалі. Енергії іонізації донорів  $E_i = E_c - E_d$  (у електрон-вольтах) у германію і кремнію приведені в табл.41.2. У першому стовпці зазначений елемент основного кристала і ширина забороненої зони  $\Delta E$ .

Таблиця 41.2

Легуючий елемент		P	As	Sb
Si, $\Delta E = 1,14$ eB	$E_i = E_c - E_d$ , eB	0,045	0,049	0,039
Ge, $\Delta E = 0,67$ eB	$E_i = E_c - E_d$ , eB	0,0120	0,0127	0,0096

Механізм провідності дірчастих напівпровідників розглянемо на прикладі тривалентної домішки бору. Подібно тому, як введення в Ge чи Si домішки атомів п'ятивалентного елемента приводить до появи електронів, введення домішки атомів тривалентних елементів приводить до появи дірок - незаповнених хімічних зв'язків (рис. 41.4, а). При цьому поблизу стелі валентної зони з'являються вільні енергетичні рівні домішкового атома (рис. 41.4, б)

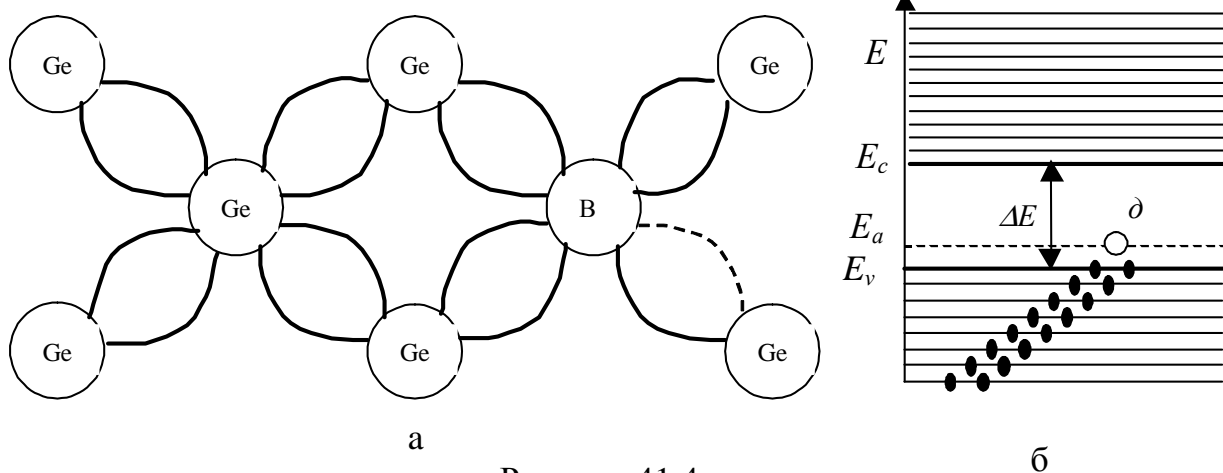


Рисунок 41.4

Якщо один з електронів у валентній зоні одержує енергію достатню для переходу на акцепторний рівень  $E_a$ , то відбувається іонізація домішки - атом домішки стає негативним іоном, а дірка стає рухливою. В електричному полі дірка поводить себе подібно позитивному заряду, рухаючи в напрямку вектора напруженості електричного поля (див. п. 41.2).

Домішки, що захоплюють електрони з валентної зони, називаються акцепторами. Значення енергій іонізації акцепторів у германії і кремнії приведені в табл. 41.3 (енергія зазначена в електрон-вольтах).

Таблиця 41.3

Легуючий елемент		B	Al	Ga	In
Si, $\Delta E = 1,14$ eB	$E_i = E_a - E_v$ , eB	0,045	0,057	0,065	0,16
Ge, $\Delta E = 0,67$ eB	$E_i = E_a - E_v$ , eB	0,0104	0,0102	0,0108	0,011,5

Крім домішкових атомів, поява дозволених рівнів у забороненій зоні зв'язана також з порушенням ідеальної періодичності ґрати: вакансії, атоми в міжвузлях, дислокації тощо. При опроміненні напівпровідника електромагнітним випромінюванням високих частот, швидкими електронами й іншими частками високих енергій у кристалічних ґратах виникають так звані радіаційні дефекти, що також можуть утворювати додаткові рівні в забороненій зоні.

Дослідження положення рівня Фермі в домішкових напівпровідниках, проведені аналогічно тому, як це виконано для чистих напівпровідників (див. п. 41.2), приводять до наступних результатів. При  $T = 0 \text{ K}$  рівень Фермі лежить у середині між  $E_c$  і донорним рівнем. З ростом температури він спочатку підвищується, наближаючись до дна зони провідності, проходить через максимум, потім опускається. Результати для акцепторного напівпровідника такі ж, як і для донорного, якщо характеристики донора замінити характеристиками акцептора.

Положення рівнів Фермі в напівпровідниках при  $T = 0 \text{ K}$  приведено на рис. (41.5). На рис. 41.5 а представлений власний напівпровідник, а на рис. 41.5 б і 41.5 в – відповідно донорний і акцепторний напівпровідники.

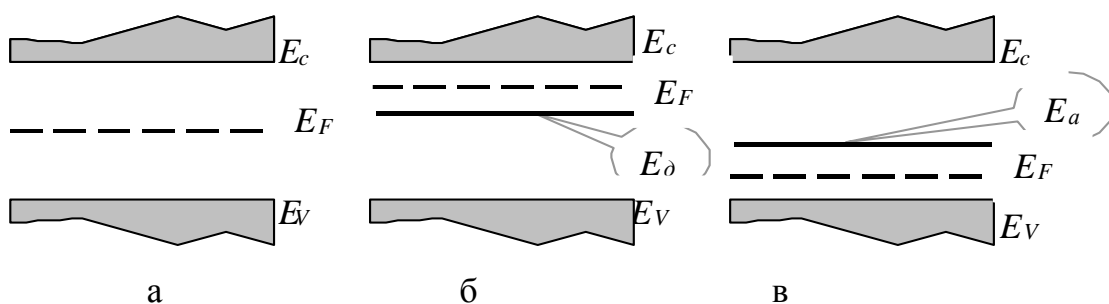


Рисунок 41.5

Концентрація електронів і дірок визначає питому електропровідність напівпровідника, оскільки енергія іонізації домішок (див. табл. 40.2 і 40.3) порівнянна з енергією теплових коливань ґратки ( $kT = 0,026 \text{ eV}$  при кімнатній температурі), то в першу чергу активізується домішковий механізм провідності. І, якщо, наприклад, концентрація електронів у зоні провідності переважає над концентрацією дірок, то провідність напівпровідника буде електронною, а напівпровідник - *електронним* або *n-типу*. Якщо переважає концентрація дірок над концентрацією електронів, то провідність буде дірковою, а напівпровідник - *дірковим* або *p-типу*.

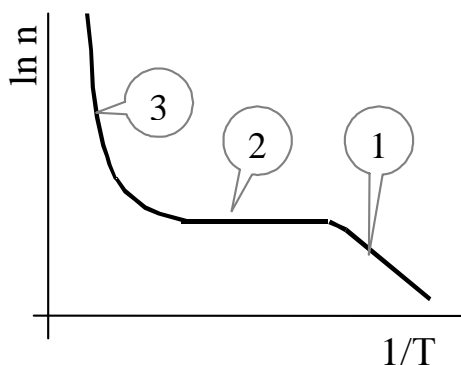


Рисунок 41.6

З підвищенням температури концентрація домішкових носіїв струму швидко досягає насичення, - *домішка виснажується*, а власна провідність (змішаного типу) росте і при високих температурах стає визначальною електропровідністю напівпровідника.

Залежність логарифма концентрації носіїв струму, а значить і електропровідності напівпровідника від зворотної температури приведена на рис. 41.6. При низьких температурах ( $1/T$  - велике) істотну роль грає домішкова провідність (ділянка 1); ділянка 2 відповідає температурам виснаження домішок; ділянка 3 - провідність практично власна.

Тип провідності напівпровідника можна установити експериментально, використовуючи результати дослідження ефекту Хола в напівпровідниках.

#### 4 Контактні явища в напівпровідниках. Властивості $p$ - $n$ -переходу

Розглянемо електричний контакт двох напівпровідників різної домішкової провідності. Електричний контакт забезпечується, якщо в тому самому зразку напівпровідникового матеріалу одна ділянка має  $p$ -провідність, а інша –  $n$ -провідність (рис. 41.7). У силу того, що концентрації електронів і дірок по різні сторони від ділянки контакту різко різні, почнуться дифузійні процеси: електрони переходять в область з  $p$ -провідністю, а дірки, навпаки, - в область з електронною провідністю. Тому що до початку процесів дифузії обидві ділянки були електрично нейтральними, то область з  $p$ -провідністю заряджається негативно, а з  $n$ -провідністю - позитивно. Виникне електричне поле  $\vec{E}$  (див. рис. 41.7), спрямоване від  $n$ -ділянки до  $p$ -ділянки, що перешкоджає процесу дифузії. Через деякий час установиться динамічна рівновага з подвійним шаром різнойменних зарядів, що характеризується рівноважним значенням

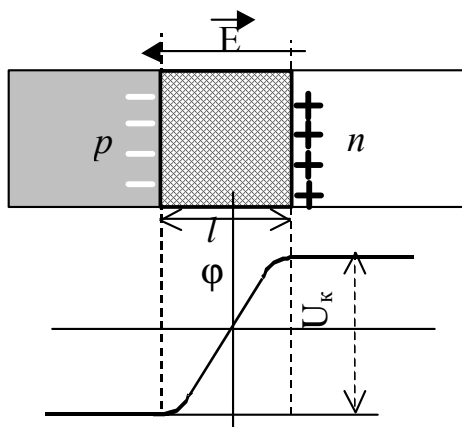


Рисунок 41.8

напруженості поля  $\vec{E}$  і визначеною контактною різницею потенціалів  $U_k$  (рис. 41.8). У процесі переміщення носіїв вони, зустрічаючись, взаємно нейтралізуються (рекомбінують): електрон займає місце дірки і, отже, зникає пара носіїв струму. Відбувається це в деякому вузькому приконтактному шарі кристала (виділена штрихуванням область на рис. 41.8), що стає, таким чином, збідненим носіями струму і має великий питомий опір. Опір цього шару електричному струму залежить

також від його глибини  $l$ . Глибина приконтактного шару визначається кількістю переміщених носіїв струму, необхідних для створення даної різниці потенціалів  $U_k$ . Вона може бути оцінена, якщо розглядати подвійний електричний шар як плоский конденсатор ємності

$$C = \frac{\Delta q}{U_k} = \frac{\epsilon \epsilon_0 S}{l}, \quad (41.11)$$

де  $\Delta q = enSl$  - заряд, перенесений у процесі дифузії одним видом носіїв струму (модуль заряду однієї з «пластин» конденсатора);  $e$  - заряд носіїв

струму;  $n$  – концентрація носіїв;  $S$  - площа поперечного переріза зони контакту.

Підстановка виразу для переміщеного заряду дає можливість обчислити  $l$ :

$$\frac{enSl}{U_{\kappa}} = \frac{\epsilon\epsilon_0 S}{l} \Rightarrow l = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0}{en} U_{\kappa}}. \quad (41.12)$$

Контактна різниця потенціалів, звичайно порядку одного вольт. Діелектрична проникність, наприклад, германія  $\epsilon = 16$ ;  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$ ;  $n \approx 10^{21} \text{ 1/м}^3$ . Підстановка цих даних у формулу (41.12) дає результат  $l \approx 10^{-6} \text{ м}$ , що складає тисячі міжатомних шарів і приводить до великого опору приконтактного шару в цілому. Саме цей подвійний електрично заряджений шар, збіднений основними носіями струму, носить назву *запірного шару* або *p-n-переходу*.

Розглянуті вище процеси в *p-n-переході* схематичні. У дійсності домішкова провідність здійснюється на тлі провідності базового кристала германію чи кремнію, а вона є провідність змішаного типу (див. п. 41.2). Отже, поряд з основними домішковими носіями струму, існують не основні: у *p-ділянки* це електрони, а в *n-ділянки* - дірки. Електричне поле подвійного електричного шару перешкоджає переміщенню основних носіїв заряду. Однак це поле буде прискорюючим для не основних носіїв заряду, і вони почнуть переходити в ділянки з протилежною електропровідністю. Перехід не основних носіїв приводить до зменшення об'ємного заряду й електричного поля в переході. Як наслідок, має місце додатковий дифузійний струм основних носіїв, у результаті чого електричне поле в переході прагне до вихідного значення. В остаточному підсумку встановлюється динамічна рівновага, при якій через *p-n-перехід* рухаються два зустрічних потоки носіїв струму, що взаємно компенсують один одного. Сумарна густина струму через *p-n-перехід у стані рівноваги* дорівнює нулю.

*Опір подвійного електричного шару* в напівпровідниках сильно залежить від полярності підключення зовнішнього джерела струму. Підключення зовнішнього джерела струму до *p-n-переходу* позитивним полюсом до *p-ділянки*, а негативним до *n-ділянки* сприяє зменшенню висоти потенційного бар'єра, зменшує глибину  $l$  цього шару [див. формулу (41.12) і рис. 41.8], що сприяє поновленню дифузійних потоків носіїв і проходженню струму через *p-n-перехід*. Таке підключення називається *прямим* або *пропускним*. Напрямок підключення, коли до *n-ділянки* включають плюс, а *p-ділянки* – мінус, сприяє збільшенню висоти потенційного бар'єра і збільшує глибину  $l$  цього шару. Основний струм через *p-n-перехід* відсутній. Цей напрямок включення називається *зворотним* або *запірним*. Таким чином, *p-n-перехід* має яскраво виражену однобічну провідність, що і визначає його використання як нелінійний елемент в електричних колах для випрямлення, наприклад, змінного струму та інше.

Завдяки наявності поряд із домішковою основної провідності базових матеріалів кристалів і, тим самим не основних носіїв, електричне поле

*p-n*-переходу сприяє руху не основних носіїв і через перехід йде зворотний струм. Цей струм у мільйони разів менше основного, однак він створює додаткові труднощі у використанні напівпровідникових приладів. Зокрема в процесі роботи матеріал кристала розігрівається, що сприяє росту власної провідності і збільшенню зворотного струму. При досягненні температур, коли домішкова провідність виснажується (див. п. 41.3 і рис. 41.6), струм прямого і зворотного напрямку практично зрівняється, *p-n*-перехід зникне. Для боротьби з такими явищами потрібно стабілізація температурного режиму роботи напівпровідникових приладів.

**Примітки.** 1) *Напівпровідники і власні і домішкові пропускають електричний струм у прямому і зворотному напрямках абсолютно однаково. Вентильні властивості має тільки *p-n*-перехід.*

2) *Контакт двох різних металів дає таку ж саме за величиною контактну різницю потенціалів, однак, завдяки тому, що концентрація електронів провідності в металах у мільйони разів більше, ніж у напівпровідників, приконтактній шар у них [див. формулу (41.12)] менше однієї міжатомної відстані і не створює значного опору струму. Однак контакт «напівпровідник-метал» у тому випадку, коли носії переходять з напівпровідника в метал, має односторонню провідність і, за прийнятою домовленістю, також називається *p-n*-переходом.*

Основною характеристикою напівпровідникового діода є його вольт-амперна характеристика, тобто залежність сили струму через прилад при прямій і зворотній напругах, що прикладаються до нього (рис. 41.9). Тому що

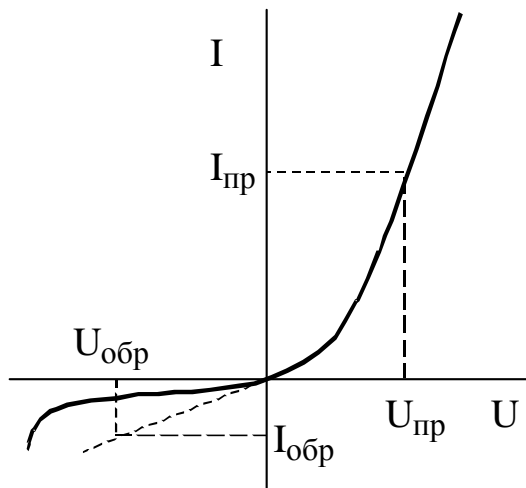


Рисунок 41.9

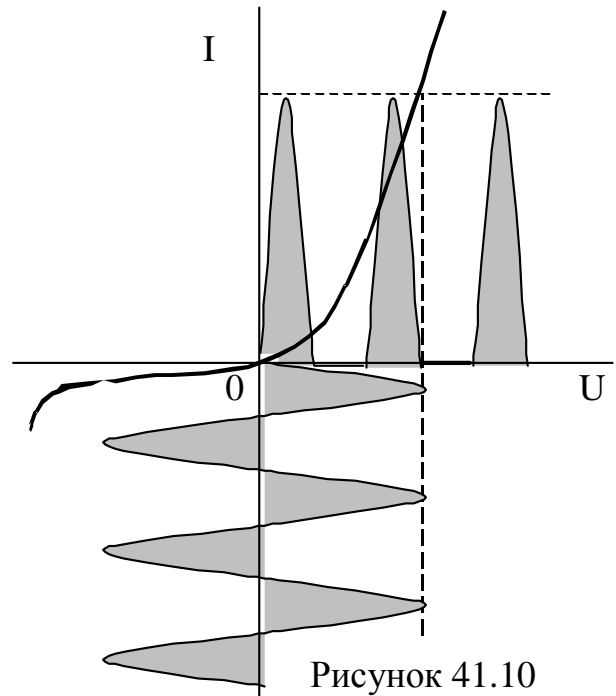


Рисунок 41.10

зворотний струм у десятки мільйонів разів менше прямого, то на єдиному рисунку й у єдиному масштабі графік можна представити тільки умовно.

Основним робочим параметром діода є коефіцієнт випрямлення, що установлює відношення прямого і зворотного струмів через прилад при рівних за модулем напругах:

$$k = \frac{I_{np}}{I_{обр}}; \quad U_{np} = U_{обр}. \quad (41.13)$$

Особливості вольт-амперної характеристики діода дозволяють зрозуміти його випрямляючу і детектуючу властивості. На рис. 41.10 представлені графіки подаваної на діод синусоїдальної напруги і результат перетворення його в практично знакопостійний пульсуючий струм після діода. Зворотний струм у мільйони разів менше прямого. Проте, його наявність неминуча навіть теоретично.

## 42 Теплові та електричні властивості металів

1 Теплоємність металічних кристалів. Вироджений фермі-газ електронів в металі. Енергія Фермі. Теплоємність електронного газу.

2 Термоелектрична емісія. Контактні електричні явища в металах. Термоелектронні явища: Зеєбека, Пельтьє і Томсона.

1 Теплоємність металічних кристалів. Вироджений фермі-газ електронів в металі. Енергія Фермі. Теплоємність електронного газу

Як на те було вказано в п. 38.1, класична електронна теорія металів не дає можливості зрозуміти, чому електронний газ вільних електронів, що знаходиться в стані теплової рівноваги з вузлами кристалічних ґраток металічних кристалів не дає свого вкладу в теплоємність металів. Відповідь на це питання дає квантова теорія металів, яка розглядає електронний газ металів, як вироджений фермі-газ (див. п. 40.2), що підкоряється розподілу електронів за енергією Фермі-Дірака

$$dN(E) = f(E)g(E)dE = 2 \frac{4\pi m^{3/2} V \sqrt{E}}{h^3} \frac{dE}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1}. \quad (42.1)$$

В формулі (42.1) коефіцієнт 2 пов'язаний з тим, що дану енергію можуть мати два електрони з антипаралельними спінами. Таким чином, концентрація електронів з енергіями в інтервалі  $(E, E+dE)$ :

$$dn(E) = \frac{dN(E)}{V} = \frac{8\pi m^{3/2} \sqrt{E}}{h^3} \frac{dE}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1}. \quad (42.2)$$

Виходячи з того, що  $E_F$  – це максимальна енергія електронів фермі-газу за  $0 K$ , та виходячи з розглянутих в п. 40.2 властивостей функції Фермі-Дірака [див. формулу (40.8) та її властивість  $a$ ) і рис. 40.5], маємо для загальної концентрації електронів:

$$n(E) = \frac{8\pi m^{3/2}}{h^3} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{8\pi m^{3/2}}{h^3} \frac{2}{3} E_F^{3/2}. \quad (42.3)$$

З формули (42.3) випливає, що енергія Фермі:

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3} \quad (42.4)$$

визначається, в основному, концентрацією електронів провідності. Залежність, незначна, від температури пов'язана, наприклад, із зміною об'єму тіла при зміні температури. Залежність енергії Фермі від температури має таку форму:

$$E_{FT} = E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{2} \left( \frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]. \quad (42.5)$$

Зважаючи на те, що  $kT \ll E_F$  це дійсно дуже мала поправка.

Середнє значення енергії електронів провідності  $\langle E \rangle = \int_0^\infty E g(E) f(E) dE = \frac{3}{5} E_{FT}$  і за умови концентрації електронів провідності в металах  $n \sim 10^{29} \text{ м}^{-3}$ , маємо для середнього значення енергії електронів

$$\text{провідності } \langle E \rangle = \frac{3h^2}{10m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3} = \frac{3(6,02 \cdot 10^{-34})^2}{10 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} \left( \frac{3 \cdot 10^{29}}{8\pi} \right)^{2/3} \approx 6,2 \cdot 10^{-19} (\text{Дж}) = 4 \text{ eV},$$

що значно перевищує енергію коливань вузлів кристалічних ґраток  $\langle E \rangle \approx kT = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}} \cdot 300 \text{ K} \approx 4 \cdot 10^{-21} \text{ Дж} \approx 0,025 \text{ eV}$ . Тобто температура електронного газу відповідає десяткам тисяч кельвінів, і електронний газ дійсно вироджений і не підкоряється класичному розподілу Максвелла-Больцмана.

Теплоємність одного моля електронного газу  $C_M = \frac{\partial U_M}{\partial T}$ , де

$$U_M = N_A \langle E \rangle = N_A \frac{3}{5} E_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{2} \left( \frac{kT}{E_F} \right)^2 \right] \text{ внутрішня енергія одного моля}$$

електронного газу. Таким чином,

$$C_M = \frac{\pi^2 N_A k^2}{2E_F} T. \quad (42.6)$$

За значення температури  $T \rightarrow 0 \text{ K}$  молярна теплоємність електронів провідності також прагне до нуля:  $C_M \rightarrow 0$  і електрони провідності не приймають участі в обміні теплом з вузлами кристалічних ґраток металу. Цим пояснюється виконання закону (39.1), закону Дюлонга-Пті, для металічних кристалів.

2 Термоелектрична емісія. Контактні електричні явища в металах.  
Термоелектронні явища: Зеєбека, Пельтьє і Томсона

Термоелектрична емісія – це явище виходу (емісії) електронів з поверхні розжарюваних твердих (як правило) тіл. Яке на те було вказано в попередньому пункті (див. п. 42.1), електрони провідності в металах за не дуже високих температур знаходяться у виродженому стані з енергіями близькими до енергії Фермі (див п. 40.2, та рис. 40.6). Електрони провідності, таким чином, можна вважати, в першому наближенні, такими, що знаходяться в прямокутному потенційному ящику.

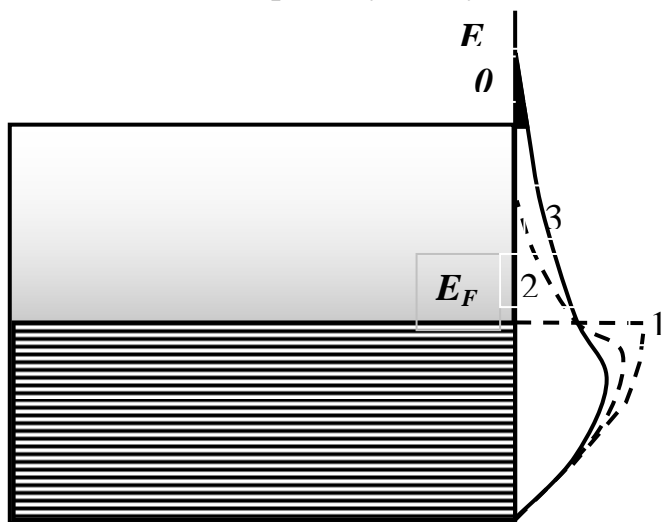


Рисунок 42.1

Розподіл електронів за енергіями [див. формулу (41.1)] при різних температурах металу графічно представлений на рис. 42.1. Зо нуля кельвінів електрони провідності розташовані на дозволених рівнях, що знаходяться нижче енергії Фермі  $E_F$  (графік розподілу 1 на рис. 42.1). Рівень, що відповідає енергії Фермі, заповнений на половину. Для того, щоб електроні змогли вийти за межі металу, їм необхідно надати енергію  $E = 0 - E_F$ , що визначає собою так звану роботу виходу  $A_e = E = |E_F|$  (Електрон за межами металу має нульову енергію. Енергія Фермі – негативна) . Таку енергію електрони провідності можуть отримати за рахунок теплової енергії. Із збільшенням температури графік-сходінка розмивається (крива 2) і, за деякої температури, характерної для кожного матеріалу, частина електронів отримує змогу вийти за межі металу. Ця частина (залита темним кольором частина кривої 3 на рис. 42.1) буде збільшуватись з ростом температури.

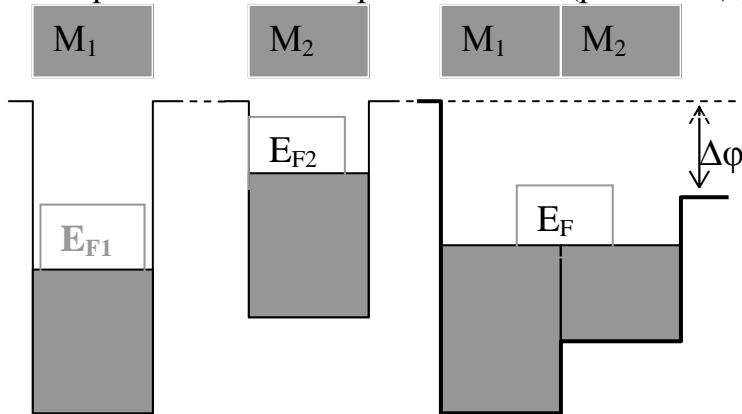
Явище термоелектронної емісії можна розглядати як процес випаровування електронів з емітера. На емісію електронів витрачається тим більше теплоти, чим більша робота виходу. Її можна змінювати за рахунок легування металів, наприклад, рідкісноземельними елементами. Процес виходу електронів з металу призводить до створення його додатного електричного заряду, між «випареними» електронами та металом створюється електричне поле, яке втягує емітовані електроні в метал. За стану динамічної рівноваги між емітованими та конденсованими електронами створюється певна концентрація електронів в електронній хмарі, що утримується біля поверхні металу. Вона може бути розрахованою з термодинамічного розгляду системи: емітер – рівноважний електронний газ. Якщо створити зовнішнє електричне поле, то виникне електричний струм,

що може зростати до певного значення густини струму, коли всі емітовані електрони приймуть участь у створенні струму – струму насичення. Густина струму насичення  $j$  пов'язана з рівноважною концентрацією електронів в електронній хмарі (за даної температури певного емітера) і визначається співвідношенням:

$$j = AT^2 e^{\frac{e}{kT}}, \quad (42.2)$$

де  $A$  - деяка постійна величина.

*Контактні електричні явища в металах.* Якщо привести в електричний контакт різні метали (рис. 42.2), то, у випадку термодинамічної



рівноваги, енергії Фермі всіх тіл зрівнюються. Якщо це різні метали, то на границі металів виникне різниця потенціалів, - контактна різниця потенціалів:

$$\Delta\varphi = \frac{E_{F2} - E_{F1}}{e}, \quad (42.3)$$

де  $e$  – елементарний заряд.

Термоелектричними називаються фізичні явища,

обумовлені наявністю взаємозв'язку між тепловими та електричними процесами в електричних провідниках.

Рисунок 42.2