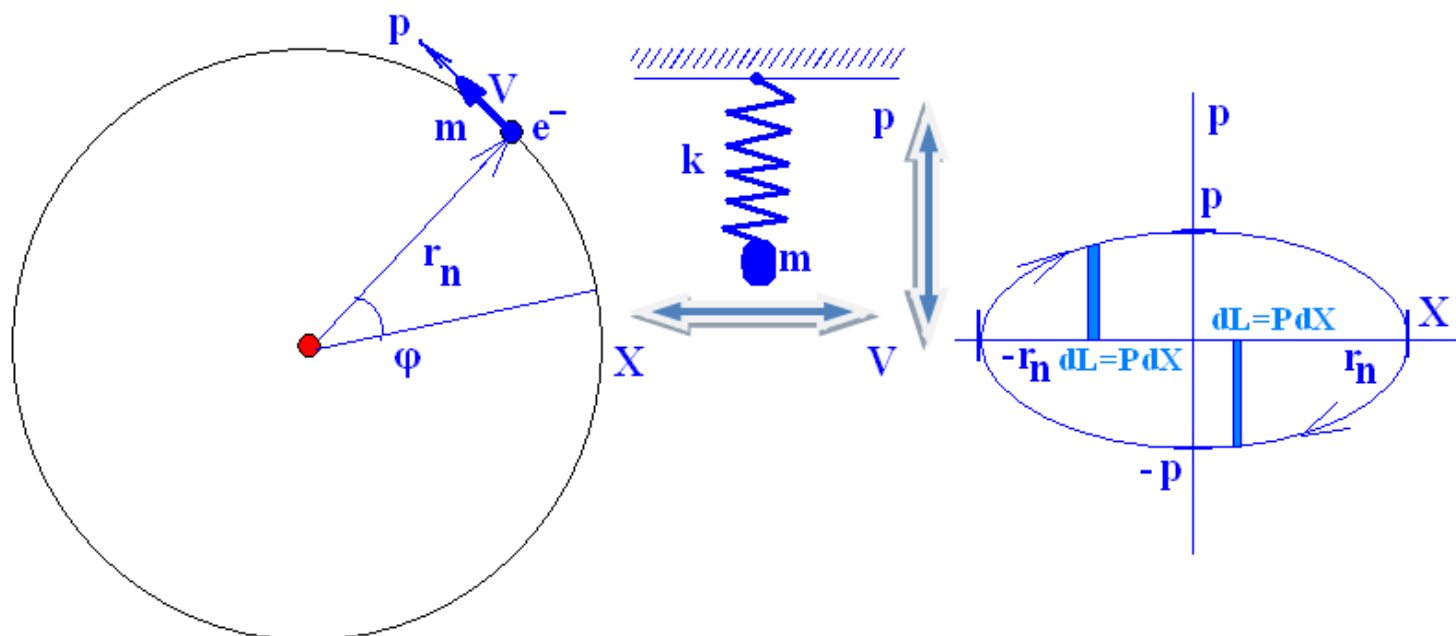


Правило квантования энергии для модели атома Бора.



Правило квантования энергии для модели атома Бора.

Исходя из постулата Планка для стационарных орбит электрона: $E_n = nh\nu$,

E_n – полная энергия гармонического осциллятора; n – целое число (1, 2, 3...), h – постоянная Планка, $\nu = \omega/2\pi$ – циклическая частота осциллятора. На рисунке представлен, как аналог гармонического осциллятора, пружинный маятник. Если координату гармонического осциллятора (электрон в атоме, пружинный маятник и т.д.) обозначить X , а импульс – p , то полная энергия может быть записана суммой кинетической и потенциальной энергий:

$$nh\nu = \frac{p^2}{2m} + \frac{kX^2}{2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 X^2}{2}.$$

Следовательно, $1 = \frac{p^2}{2mnh\nu} + \frac{X^2}{nh/2\pi^2 m\nu}$. Это уравнение, изображенного на

рисунке эллипса, который называется фазовой траекторией гармонического осциллятора. Координатную плоскость (X p) называют фазовой плоскостью.

Площадь эллипса имеет размерность момента импульса и равна произведению полуосей, умноженному на π : $\pi\sqrt{2mnhv}\sqrt{nh/2\pi^2mv} = nh$. Для электрона, находящегося в атоме под действием центральной силы, можно применить представления классической физики, тогда его момент импульса (\mathbf{L}) относительно ядра: $\mathbf{L}=\mathbf{I}\cdot\boldsymbol{\omega}$, где \mathbf{I} – момент инерции $m\mathbf{r}^2$, $\boldsymbol{\omega}$ – угловая скорость $d\phi/dt$. Поскольку со стороны ядра действует центросимметричная сила и внешний момент сил равен нулю, можно применить закон сохранения момента импульса: $\int \mathbf{L}d\phi = L \int d\phi = L2\pi$. Получаем $nh = L2\pi$, т.е. $L = nh/2\pi = n\hbar$ - **правило квантования момента импульса** для электрона, из которого следует, что момент импульса электрона внутри атома не может изменять свою величину непрерывно, а принимает значения кратные \hbar ($\hbar, 2\hbar, 3\hbar$ и т. д.).

Итак, для связанного ядром атома электрона возможны только орбиты, для которых момент импульса $\mathbf{L}=\mathbf{I}\cdot\boldsymbol{\omega}=m\mathbf{r}^2\mathbf{V}/r=m\mathbf{V}r=n\hbar$.

Если ядро атома имеет заряд \mathbf{Ze} (для водорода $\mathbf{Z}=1$) можно записать уравнение отвечающее равенству центростремительной силы (силы Кулона) и центробежной силы инерции: $k\mathbf{Ze}^2/r^2=m\mathbf{V}^2/r$, с учетом $m\mathbf{V}r=n\hbar$, получаем $\mathbf{V}=n\hbar/mr$ и $k\mathbf{Ze}^2/r=m\mathbf{V}^2=n^2\hbar^2/mr^2$; $\gg r_n=n^2\hbar^2/mk\mathbf{Ze}^2$ и для первой орбиты атома водорода (боровский радиус) $r_n=\hbar^2/mke^2$.

Вычислим энергию атома как сумму кинетической энергии электрона и его взаимодействия в потенциальном поле кулоновского взаимодействия с ядром, которое неподвижно. С учетом, что энергия свободного электрона начнет свой отсчет с нуля, потенциальная энергия взаимодействия электрона и ядра должна быть отрицательной величиной. Следовательно, $\mathbf{E}=\mathbf{E}_k+\mathbf{E}_{\text{пот}}=m\mathbf{V}^2/2 - k\mathbf{Ze}^2/r$. Ранее мы получили, что $k\mathbf{Ze}^2/r=m\mathbf{V}^2$ и можем записать $m\mathbf{V}^2/2 =k\mathbf{Ze}^2/2r$; тогда, $\mathbf{E}=\mathbf{E}_k+\mathbf{E}_{\text{пот}}= k\mathbf{Ze}^2/2r - k\mathbf{Ze}^2/r = -k\mathbf{Ze}^2/2r$. Таким образом, величина кинетической энергии электрона по модулю составляет строго половину от потенциальной. Поэтому, для того чтобы покинуть ядро атома электрону необходимо удвоить свою кинетическую энергию.

Подставляя выражение $r_n=n^2\hbar^2/mk\mathbf{Ze}^2$ в $\mathbf{E}=-k\mathbf{Ze}^2/2r$, получим внутреннюю энергию атома $\mathbf{E}=-k^2\mathbf{Z}^2e^4m/2n^2\hbar^2$, где n – натуральный ряд чисел. Поскольку это число определяет величину энергии и факт её квантования, будем называть n **главным квантовым числом**.

При переходе атома водорода ($\mathbf{Z}=1$) из состояния n в состояние m происходит излучение (если $n>m$) или поглощение (если $n<m$) атомом кванта энергии.

$$\hbar\omega = E_n - E_m = -\frac{k^2 e^4 m}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad \omega = E_n - E_m = -\frac{k^2 e^4 m}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Вне рамок классической физики теория Бора позволяет получить обобщенную формулу Бальмера, т.е. даёт подтверждение экспериментальных данных. Однако, дальнейшие эксперименты показали несостоятельность этой теории.

«Уточняйте понятия, и это избавит человечество
от многих заблуждений»

Р. Декарт

Элементы квантовой физики **Гипотеза де-Бройля. Волновые свойства микрочастиц.**

Недостатки теории Бора инициировали критический пересмотр этой гипотезы и дальнейшее развитие квантовой физики. Ранее, в рамках теории относительности, Эйнштейн дал инвариантное выражение энергии частицы через импульс: $E = c\sqrt{m^2c^2 + p^2}$, где c – скорость света; m – масса и p – импульс частицы. Для неподвижной частицы ($p=0$) $E = mc^2$, а для частицы, без массы ($m=0$), например фотона, $E = cp$. Из правила квантования энергии:

$\hbar\omega = h\nu = E$, поэтому импульс частицы $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{hc}{c\lambda} = \frac{h}{\lambda}$.

Следовательно, любой волновой процесс или фотон, как микрочастица вещества обладает импульсом $p = \frac{h}{\lambda}$.

Луи де-Бройль, исходя из симметрии физических явлений, выдвинул гипотезу, согласно которой для любой частицы, обладающей импульсом (p), соответствует волновой процесс с длиной волны

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (1)$$

Таким образом, исходя из представлений симметрии, можно сформулировать положение: любой волновой процесс кроме волновых свойств (преломление, дифракция, дисперсия, интерференция) обладает свойствами частицы (импульс, момент импульса, кинетическая энергия, траектория), а любая частица (корпускула) обладает свойствами волнового процесса. Это положение известно, как принцип корпускулярно – волнового дуализма. *Дуализм* – двойственность поведения, свойственная

всем физическим объектам, которые в разных обстоятельствах (условия эксперимента) проявляют разные свойства (корпускулярные или волновые). На примере фотонов попадающих на экран выясним связь волнового и корпускулярного подхода к описанию освещенности экрана. В волновом подходе – освещенность поверхности (площадью S) пропорциональна квадрату амплитуды волны (E^2), а в корпускулярном - освещенность это число (N) фотонов ($Nh\nu/St$), падающих на эту поверхность. Если освещенность составляет 50 лк (можно читать книгу), то на квадратный метр поверхности за секунду падает $N=2\cdot 10^{17}$ фотонов, или один фотон на 5 нм^2 . Для справки: на площади 5 нм^2 металлической поверхности расположено ~ 100 атомов; вероятность встречи в течение одной секунды фотона и атома составляет 0,01. Если P – вероятность попадания фотона в заданную точку экрана, то dP/dV – плотность вероятности обнаружения фотона в объеме dV . Следовательно,

$$\frac{dP}{dV} \propto E^2 \propto Nh\nu/t, \quad (2)$$

распределение фотонов имеет статистический характер и вероятность обнаружения фотона пропорциональна квадрату амплитуды электромагнитной волны.

Движение электрона в атоме и вне атома эквивалентно волновому процессу с частотой $\nu=E/h$ и длиной волны $\lambda=h/mV$ (3).

Свободный электрон в процессе своего движения тоже проявляет свойства электромагнитной волны – участвует в явлениях дифракции и интерференции. На рисунке 1 представлены картины дифракции пучка электронов при прохождении сквозь тонкие пленки металлов.

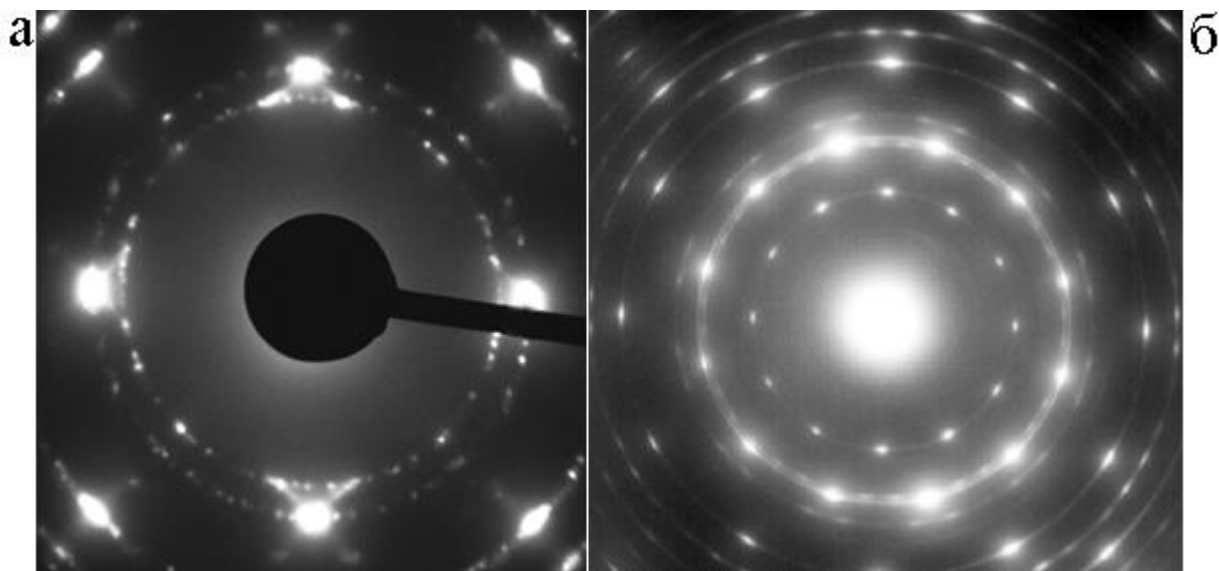


Рис. 1 – Фрагменты картин дифракции пучка быстрых (кинетическая энергия 100000 эВ) электронов при прохождении сквозь тонкие пленки металлических сплавов: а) палладий – никель; б) палладий медь.

Рисунок 1 иллюстрирует волновые свойства свободного электрона. Поскольку в рамках классической физики нет подходов к описанию подобных явлений, возникла необходимость в новом разделе ФИЗИКИ – механика микрочастиц, такой подход был создан Э. Шрёдингером, В. Гейзенбергом и получил название «*Квантовая механика*».

Состояние микрочастицы в *Квантовой механике* описывает волновая функция микрочастицы (Ψ). Соотношение (1) определяет квадрат амплитуды световой волны как вероятность попадания фотона в объем dV , аналогично, в любой точке пространства квадрат модуля волновой функции микрочастицы умноженный на dV в окрестности этой точки определяет вероятность (dP) того, что эта микрочастица находится внутри dV :

$$dP = \|\Psi\|^2 dV = \Psi\Psi^* dV \quad (4),$$

где Ψ и Ψ^* комплексно-сопряженные функции — две функции комплексного переменного, у которых действительные части равны, а мнимые части противоположны по знаку. Таким образом, физический смысл функции Ψ в том, что квадрат её модуля – плотность вероятности обнаружения частицы в локализованной области пространства.

Волновая функция микрочастицы зависит от координаты и времени. Для стационарных состояний электрона в атоме, когда вероятность обнаружения частицы не зависит от времени

$$\Psi = \psi e^{-i(E/\hbar)t} \quad ,$$

тогда

$$\Psi\Psi^* = \psi e^{-i(E/\hbar)t} \times \psi^* e^{i(E/\hbar)t} = \psi\psi^* \quad (5).$$

Квантовая механика имеет статистический характер, т.е. невозможно определить местоположение частицы и траекторию её движения. Квантовая механика дает возможность вычислить вероятность обнаружения частицы в выделенной области пространства. Это соответствует реальному поведению микрочастицы в пространстве – микрочастица не может иметь конкретных координат, величины импульса, момента импульса и траектории, т.к. обладает волновыми свойствами и может (с вычисляемой вероятностью) находиться в разных точках пространства.

Основным уравнением в *Квантовой механике* выступает уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x, y, z)\Psi = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (6),$$

где $\hbar = h/2\pi$; m – масса микрочастицы; $U(x, y, z)$ – потенциальная энергия

микрочастицы в точке пространства с координатами (x, y, z) ; $\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} +$

$\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$; i – мнимая единица; t – время.

Подставляя выражение (5) в (6), получим

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0 \quad (7)$$

дифференциальное уравнение для определения волновой функции микрочастицы, находящейся в стационарном состоянии, которое не изменяется во времени.

В дальнейшем мы будем пользоваться только уравнением (7), которое называется уравнением Шрёдингера для стационарных состояний или

уравнением Шрёдингера без времени. Если микрочастица абсолютно свободна, например электрон движется в вакууме без внешних силовых полей, то $U=0$ и из (7) мы получим:

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0 \quad (8)$$

уравнение Шрёдингера для свободной микрочастицы (например, электрона), где E – кинетическая энергия свободной микрочастицы.

Соотношения (2) и (6) формализуют статистический подход к определению местоположения частицы в квантовой физике, т.е. нельзя определить траекторию и координаты микрочастицы. В природе микрочастиц не применимы категории классической физики, такие как местоположение и траектория. Зная аналитический вид волновой функции (решая уравнение Шрёдингера) можно определить вероятность, с которой микрочастица будет обнаружена в заданной части пространства.

Физический принцип, не допускающий точного местоположения микрочастицы в пространстве – соотношение неопределенностей, сформулированное Гейзенбергом.

Гейзенберг постулировал: частица не может одновременно характеризоваться точной координатой (x) и соответствующей этой координате проекцией вектора импульса (p_x). Неопределённости значений этих величин удовлетворяют условию:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x > \hbar; \Delta y \cdot \Delta p_y > \hbar; \Delta z \cdot \Delta p_z > \hbar \quad (9).$$

Таким образом, возможны состояния микрочастицы, при которых она имеет:

1) конкретное местоположение (x, y, z), но величина импульса не определена – можно узнать, где частица, но неизвестно куда она движется;

2) конкретную величину импульса (p_x, p_y, p_z), но местоположение не определено – можно узнать, куда она движется, но неизвестно где расположена частица. $\Delta x = 0.1 \text{ нм} = 10^{-10} \text{ м}$ $\Delta p_x = 10^{-24} \text{ кг м/с}$

$$10^{-31} 10^7 = 10^{-24}$$

Соотношение неопределенности Гейзенберга, могут быть записаны и для других физических величин, например, для полной энергии микрочастицы (E) и продолжительности времени (t) обладания этой энергией:

$$\Delta E \cdot \Delta t > \hbar \quad (10),$$

физический смысл в том, что возможные состояния микрочастицы, только такие при которых:

- 1) чтобы узнать величину энергии микрочастицы, необходимо измерение бесконечной длительности по времени;
- 2) в конкретный момент времени величина энергии микрочастицы не определена и неопределима.

Для момента импульса (L) микрочастицы и её угловой (φ) координаты:

$$\Delta L \cdot \Delta \varphi > \hbar \quad (11),$$

физический смысл в том, что возможны состояния микрочастицы, при которых:

- 1) если известна проекция вектора момента импульса на выделенную в пространстве ось (например, L_z), то направление вектора момента импульса не определено;
- 2) для фиксированной угловой координаты (например, φ при движении по круговой орбите) невозможно определение величины момента импульса (L) микрочастицы.

Элементы физики твердого тела

Согласно гипотезе Луи де-Бройль, любой электрон внутри твердого тела характеризуется, как волновой процесс с $\lambda = \frac{h}{p}$. Металлическое тело в форме кубика с ребром L будет накладывать граничные условия на движение электрона внутри металла; эти ограничения (Борна - Кармана) можно записать для волновой функции электрона:

$$\Psi(x,y,z+L)=\Psi(x,y,z); \Psi(x,y+L,z)=\Psi(x,y,z); \Psi(x+L,y,z)=\Psi(x,y,z); \quad (1),$$

Физический смысл этих ограничений в периодическом повторении волновой функции электрона, который движется внутри металла.

$$\text{Решение, удовлетворяющее (1) имеет вид: } \Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}; \mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (2),$$

Где V – объём металлического куба с ребром L ; $k=2\pi/\lambda$ – волновой вектор; r – радиус вектор; $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ – энергия и m – масса свободного электрона в металле.

Вероятность обнаружить электрон внутри объема V равна единице (достоверное событие): $1 = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 dr$ (3).

Чтобы понять физический смысл волнового вектора продифференцируем волновую функцию: $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \hbar \mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ (4),

где $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ – импульс свободного электрона внутри металла.

Из соблюдения условий (1) и (2) следует, что:

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1. \quad (5).$$

Учитывая, что $e^x=1$ только при условии $x=2\pi n$, где n – целое число, находим проекции волнового вектора \mathbf{k} : $k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$ (6),

где n_x, n_y, n_z – целые числа. Условие (6) – условие квантования волнового вектора.

Следовательно, в трехмерном пространстве с осями k_x, k_y, k_z (такое пространство называют **к – пространством**, которое имеет размерность $[m^{-1}]$ - обратную реальному пространству) **разрешены** только те волновые векторы, проекции которых представляют собой величины кратные $2\pi/L$, как это иллюстрирует рисунок 1.

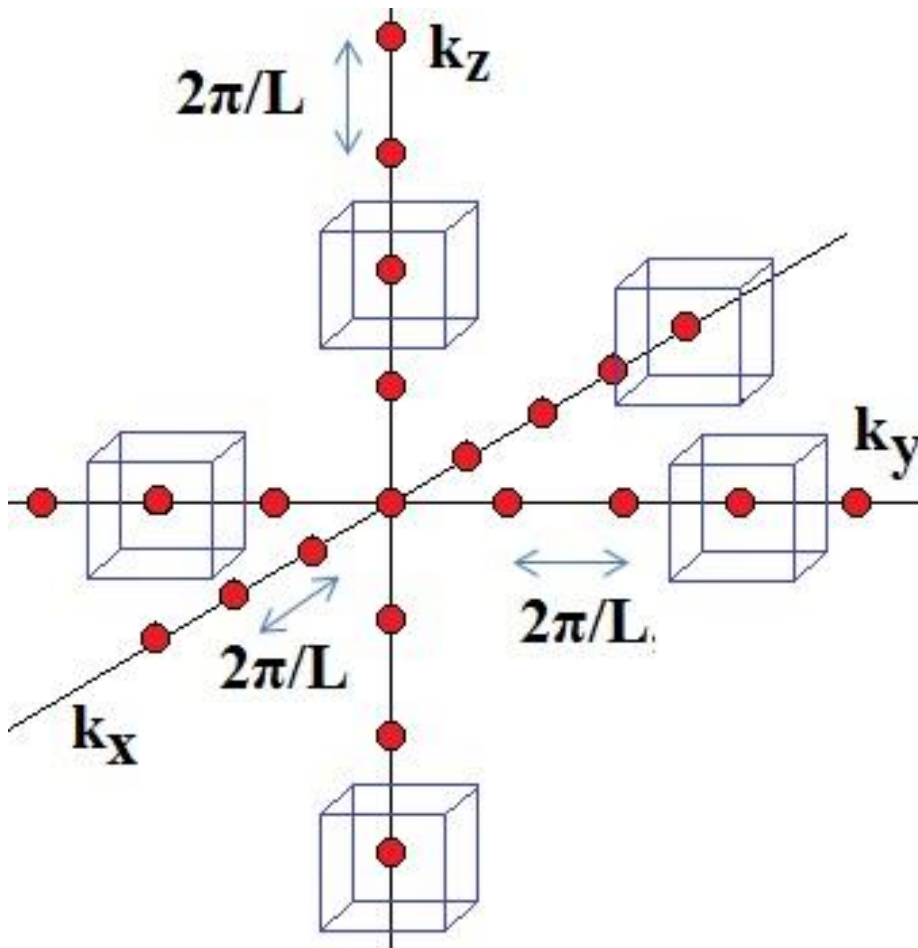


Рис. 1. – Точки обратного k - пространства с координатами $k_x = \frac{2\pi n_x}{L}$, $k_y = \frac{2\pi n_y}{L}$, $k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$. На одну точку k -пространства приходится объём $8\pi^3/L^3$.

Из условия квантования (6) можно определить число разрешенных значений величины \mathbf{k} внутри области \mathbf{k} -пространства. Число разрешенных \mathbf{k} в единице объёма \mathbf{k} -пространства (плотность уровней в \mathbf{k} -пространстве) равно $L^3/8\pi^3$ (7).

С учетом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, электроны внутри твердого тела могут иметь только разрешенные импульсы и размещены в \mathbf{k} -пространстве на одноэлектронных уровнях. **Принцип запрета Паули:** на каждый одноэлектронный уровень можно поместить не более одного электрона. Одинаковый волновой вектор \mathbf{k} могут иметь два электрона при условии, что проекция их момента импульса (**спин**) на выделенную ось в пространстве принимает одно из двух значений: $\hbar/2$ или $-\hbar/2$.

Энергия Ферми. Так как энергия электрона пропорциональна квадрату его волнового вектора ($E=p^2/2m=\hbar^2k^2/2m$), а объём любой сферы в \mathbf{k} -пространстве ($4\pi k^3/3$) заполнен с плотностью $L^3/8\pi^3$, можно записать:

$$\left(\frac{4\pi k_F^3}{3}\right) \left(\frac{L^3}{8\pi^3}\right) = \frac{k_F^3}{6\pi^2} L^3. \quad (8),$$

где k_F - будем называть фермиевским (наибольшим) радиусом в \mathbf{k} -пространстве. Каждому \mathbf{k} отвечают два электрона с противоположными *спинами*. Если в объёме $V=L^3$ имеется N электронов, то:

$$N=2\frac{k_F^3}{6\pi^2} L^3 = \frac{k_F^3}{3\pi^2} L^3 = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V \quad (9),$$

а электронная плотность внутри твердого тела равна $n=N/V=\frac{k_F^3}{3\pi^2}$.

Таким образом, в твердом теле с электронной плотностью n все одноэлектронные уровни заняты, если их $k < k_F$ и свободны, если $k > k_F$.

Будем использовать следующую терминологию: k_F – *волновой вектор Ферми* $k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}$; Сферу в \mathbf{k} -пространстве, содержащую только заполненные одноэлектронные уровни, называют *сферой Ферми*, поверхность сферы Ферми, отделяющую заполненные уровни от незаполненных, называют *поверхностью Ферми*, импульс электронов с наибольшей энергией называют *импульсом Ферми* $p_F = \hbar\sqrt[3]{3\pi^2 n}$, соответствующую скорость – *скоростью Ферми* $v_F = \hbar\sqrt[3]{3\pi^2 n}/m$, энергию – *энергией Ферми* $E_F = \frac{\hbar^2}{m} (3\pi^2 n)^{2/3}$. Из аналогии тепловой скорости

атомов классического газа и скорости свободных электронов в металле следует термин – *температура Ферми* $T_F = \frac{mv_F^2}{3k_B}$. В объеме твердого тела находится большое число электронов (например, в металлах концентрация свободных электронов $n \sim 10^{28} \text{ м}^{-3}$) и все они при $T=0^0\text{К}$ должны иметь разную энергию в интервале от нуля до наибольшей – энергии Ферми. Средняя энергия электронов в металле вычисляется по формуле: $E_{\text{ср.}} = 0.6E_F$. Все эти величины можно рассчитать, зная плотность электронов проводимости в металле. В таблице представлены эти величины для различных металлов.

Металл	Энергия Ферми, эВ	Температура Ферми, 10^4 К	Волновой вектор Ферми, 10^{10} м^{-1}	Скорость Ферми, 10^6 м/с
Li	4.74	5.51	1.12	1.29
Na	3.24	3.77	0.92	1.07
Cu	7.00	8.16	1.36	1.57
Ag	5.49	6.38	1.20	1.39
Au	5.53	6.42	1.21	1.40
Fe	11.1	13.0	1.71	1.98
Al	11.7	13.6	1.75	2.03

Распределение Ферми – Дирака.

С увеличением температуры отдельные электроны приобретают дополнительную энергию. Если при $T=0^0\text{К}$ было достоверно известно, что все энергетические уровни с $E < E_F$ заняты и все энергетические уровни $E > E_F$ свободны, то при $T > 0^0\text{К}$ возникает задача - найти вероятность обнаружения электрона с заданной величиной энергии. Такую задачу позволяет решить

$$\text{распределение Ферми – Дирака: } f_i^N = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/k_B T} + 1} \quad (10),$$

Где f_i^N – вероятность того, что в системе из N электронов i –ый энергетический уровень занят электроном; μ – химический потенциал, это

изменение свободной энергии Гельмгольца при изменении числа частиц (электронов) в системе на единицу; Для химического потенциала и энергии Ферми выполняется соотношение: $\lim_{T \rightarrow 0} \mu = E_F$; E_i – энергия энергетического уровня.

Чтобы подчеркнуть, что выражение (10) определяется (в первую очередь) энергией электрона это выражение часто заменяют функцией Ферми:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \quad (11),$$

которая успешно заменяет выражение (10) в ситуациях, когда число электронов в системе не меняется (или изменяется не существенно), система находится в термодинамическом равновесии.

Плотность энергетических уровней. Число одноэлектронных уровней в интервале энергий от E до $E+\Delta E$ называют плотностью уровней энергии:

$$g(E) = \frac{3n}{2E_F} \left(\frac{E}{E_F}\right)^{0.5} \quad (12).$$

$$\text{Вблизи у поверхности Ферми: } g(E) = \frac{3n}{2E_F} \quad (13).$$

Исходя из (11) и (12) можно записать для концентрации электронов в твердом теле:

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} g(E) f(E) dE = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{3n}{2E_F} \left(\frac{E}{E_F}\right)^{0.5} \frac{dE}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \quad (14).$$

На рисунке 2 представлены функции $g(E)$ и $f(E)$ при $T=0K$ и комнатной температуре ($k_B T/\mu=0.01$) для типичных металлов. Очевидно, $f(E)$ отличается при комнатной температуре только в очень малом интервале шириной $\sim k_B T$ вблизи μ . Электроны из верхней заштрихованной области графика на рисунке 2в переходят в нижнюю заштрихованную область. Именно эти электроны обеспечивают электропроводность и теплопроводность металлов.

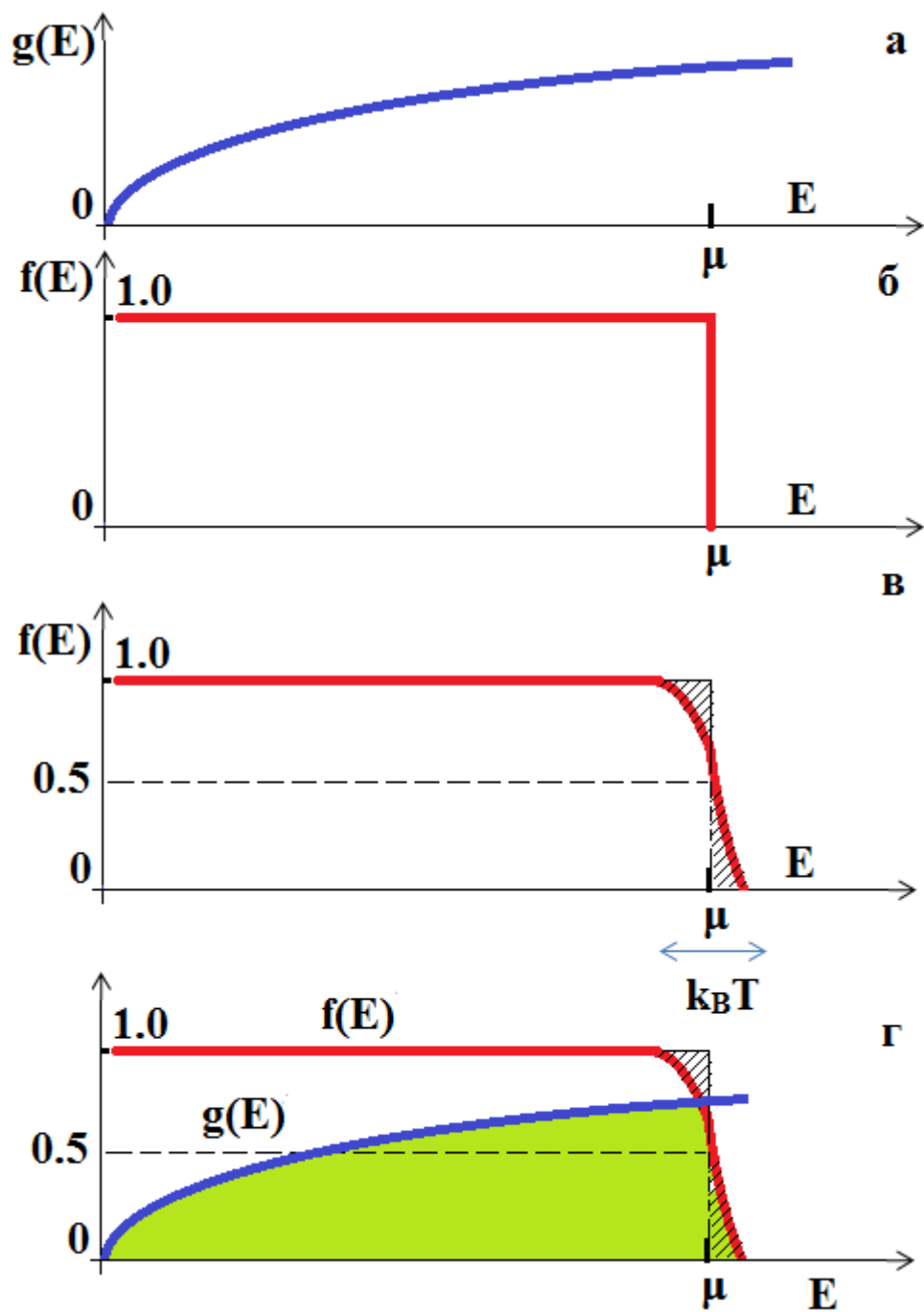


Рис. 2. – Зависимость плотности энергетических уровней (а) от энергии; зависимость функции Ферми от энергии при заданном значении μ для $T=0$ К (б) и $T \sim 0.01\mu/k_B$ (в); наложение функций $g(E)$ и $f(E)$ для иллюстрации соотношения (14).

Частица в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

Одномерная потенциальная яма. Рассмотрим частицу, находящуюся в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. В этом случае

потенциальная энергия частицы $U(x)$ имеет вид $U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x > a \end{cases}$ т.е. внутри ямы ($0 < x < a$) потенциальная энергия $U(x)$ постоянна и равна нулю, а вне ямы обращается в бесконечность (рис.4.1).

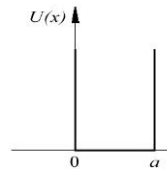


Рис. 1.

Запишем уравнение Шредингера для одномерного движения частицы вдоль оси x

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0. \quad (1)$$

Поскольку вне ямы потенциальная энергия обращается в бесконечность, то для того, чтобы выполнялось уравнение (1), необходимо, чтобы вне ямы волновая функция $\psi(x)$ обращалась в ноль, т.е. $\psi(x) \equiv 0$. Это означает, что в случае ямы с бесконечно высокими стенками частица не может выйти за пределы ямы, поскольку такие стенки являются непроницаемыми для частицы. В силу непрерывности волновая функция $\psi(x)$ должна обращаться в ноль и на границах ямы: при $x=0$ и при $x=a$.

Таким образом, задача о движении частицы в яме сводится к решению уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}E\psi = 0, \quad 0 < x < a \quad (2)$$

с граничными условиями $\psi(0) = 0$, $\psi(a) = 0$. Введем обозначение $k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E}$. (3)

При этом уравнение (2) принимает вид хорошо известного из теории колебаний уравнения $\psi'' + k^2\psi = 0$, решение которого есть $\psi(x) = A\sin(kx + \alpha)$.

Используя граничное условие $\psi(0) = 0$, получаем $A\sin \alpha = 0$, откуда следует, что $\alpha = \pm\pi \cdot m$, где $m = 0, 1, 2, 3, \dots$. Отметим, что при четных значениях m и при $m = 0$ $\psi(x) = A\sin kx$, а при нечетных значениях m $\psi(x) = -A\sin kx$. Однако, физический смысл имеет не сама волновая функция $\psi(x)$, а квадрат ее модуля $|\psi(x)|^2$, который от выбора значения m , т.е. от знака $\psi(x)$ не зависит. Поэтому без потери общности можно считать, что $\alpha = 0$. Второе граничное условие $\psi(a) = 0$ приводит к соотношению $A\sin ka = 0$, которое для $A \neq 0$

выполняется при $ka = \pm \pi n$, $n = 1, 2, 3, \dots$.

Отметим, что значение $n = 0$, формально также входящее в решение (4), не удовлетворяет условию задачи, т.к. при этом $\psi \equiv 0$, что означает, что частица в яме отсутствует. Поэтому значение $n = 0$ следует отбросить.

Подставляя (3) в (5), приходим к выражению для полной энергии частицы, движущейся в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

Важной особенностью полученного энергетического спектра (6) является его дискретность. Частица, находящаяся в потенциальной яме, может иметь только дискретные, квантованные, значения энергии, определяемые выражением (6) (см.рис.2). Отметим, что решение

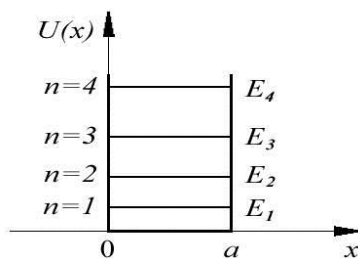


Рис. 2.

уравнения Шредингера само по себе к квантованию энергии не приводит, квантование возникает из-за граничных условий, накладываемых на волновую функцию, т.е. из-за равенства нулю волновой функции на границе потенциальной ямы.

Число n в (6), определяющее энергию частицы в яме, называется квантовым числом, а соответствующее ему значение E_n - уровнем энергии. Состояние частицы с наименьшей энергией, в данном случае с $n = 1$, называется основным состоянием. Все остальные состояния являются возбужденными: значение $n = 2$ отвечает первому возбужденному состоянию, значение $n = 3$ - второму возбужденному состоянию и т.д.

Следует отметить, что минимальное значение энергии частицы, находящейся в основном состоянии, отлично от нуля. Этот результат согласуется с соотношением неопределенностей и является общим для всех задач квантовой механики. В классической механике минимальную энергию, равную нулю, имеет покоящаяся в яме частица. Такого состояния покоя у квантовой частицы не существует.

Обсудим подробнее вопрос о дискретности энергетического спектра. Разность энергий n -го и $(n + 1)$ -го энергетических уровней ΔE_n равна

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (2n + 1).$$

Оценим величину ΔE_n для конкретных случаев.

Случай 1. Рассмотрим молекулу газа массой $m_0 \approx 10^{-27}$ кг в сосуде размером $a \approx 0,1$ м. При этом $\Delta E_n \approx 6,8 \cdot 10^{-20} \cdot n$ эВ.

Энергетическое расстояние между соседними уровнями оказывается столь малым по сравнению с энергией теплового хаотического движения молекулы kT (при комнатной температуре $kT \approx 2,6 \cdot 10^{-2}$ эВ), что практически можно говорить о сплошном энергетическом спектре движущейся молекулы.

Случай 2. Рассмотрим свободный электрон ($m_0 = 0,9 \cdot 10^{-30}$ кг) в металле ($a \approx 0,01$ м). В этом случае

$\Delta E_n \approx 7,5 \cdot 10^{-15} \cdot n$ эВ, т.е. энергетическое расстояние между уровнями много меньше характерного значения энергии электронов в металле, составляющего по порядку величины ~ 1 эВ. Однако, наличие дискретных уровней даже в случае потенциальной ямы макроскопических размеров для электронов имеет принципиально важное значение.

Случай 3. Рассмотрим электрон в атоме ($a \approx 10^{-10}$ м). При этом разность энергий соседних уровней равна $\Delta E_n \approx 0,75 \cdot 10^2 \cdot n$ эВ. Это заметная величина по сравнению, например, с энергией связи электрона в атоме ($E_{св} \sim 10$ эВ). Поэтому дискретность энергетического спектра в этом случае оказывается весьма существенной.

Рассмотрим отношение $\frac{\Delta E_n}{E_n}$ к E_n :

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}.$$

При увеличении квантового числа n это отношение уменьшается

$$\left(\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} \right)$$

, таким образом, дискретность энергетического спектра с возрастанием n играет все меньшую роль. Данный результат представляет собой проявление важного физического принципа - принципа соответствия, согласно которому при больших значениях квантового числа n , т.е. при $n \rightarrow \infty$, квантовая механика переходит в механику классическую.

Волновые функции частицы в одномерной яме. Перейдем теперь к анализу волновых функций частицы, находящейся в одномерной потенциальной яме. Из (4) с

учетом (5) получаем $\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}$. Множитель A находится из условия

нормировки волновой функции $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = A^2 \frac{a}{2} = 1$.

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Таким образом, для A получаем и волновые функции частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеют вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a}, \quad 0 < x < a, \quad (7)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

Отметим, что эти функции, в согласии с общей теорией (см. 3.5), являются

ортонормированными, т.е. $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$, где δ_{mn} - символ Кронекера

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{при } m = n \\ 0, & \text{при } m \neq n \end{cases}, \quad (4.18)$$

Графики волновых функций $\psi_n(x)$ для первых четырех значений квантового числа n приведены на рис.4.3. Волновые функции, отвечающие

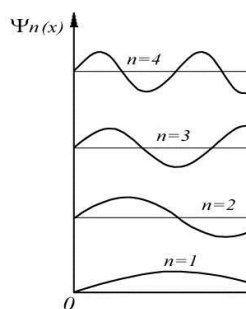


Рис. 3.

разным значениям n , существенно отличаются друг от друга. Если поместить начало координат в середину ямы, то волновые функции частицы внутри ямы для нечетных значений n будут четными функциями координаты x , и наоборот, волновые функции для четных n - нечетными функциями координаты. При увеличении квантового числа n на единицу число точек пересечения волновой функции с осью x также увеличивается на единицу.

Отличительным свойством найденных волновых функций является излом, т.е. скачок производной на границах ямы. Этот скачок возникает вследствие того, что на границах ямы потенциальная энергия частицы $U(x)$ обращается в бесконечность.

На рис.4 представлены графики квадрата модуля волновой функции $|\psi_n(x)|^2$, определяющего плотность вероятности нахождения частицы в яме.

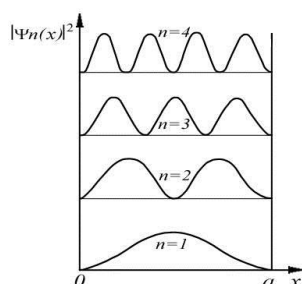


Рис. 4.

Плотность вероятности оказывается различной для разных состояний частицы, т.е. для разных значений квантового числа n . Так, например, в основном состоянии, т.е. при $n = 1$, частица с наибольшей вероятностью находится в центре ямы, а в первом возбужденном состоянии, т.е. при $n = 2$, вероятность обнаружить частицу в центре ямы равна нулю, хотя пребывание частицы в левой и правой половинах ямы равновероятно. Такое поведение кардинально отличается от поведения в яме классической частицы, для которой плотность вероятности нахождения частицы одинакова в любой точке ямы. Вероятность того, что частица в яме находится в области $x_1 \leq x \leq x_2$, определяется выражением

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx.$$

С математической точки зрения задача о движении частицы в одномерной потенциальной яме с непроницаемыми стенками аналогична задаче о колебании струны с закрепленными концами. И в том, и в другом случае из граничных условий следует, что на

ширине ямы (на длине струны) должно укладываться целое число полувольт $a = n \frac{\lambda}{2}$. В нашем случае λ - это дебройлевская длина волны частицы в яме λ_s .

Туннельный эффект микрочастицы Согласно классической механике, частица может находиться лишь в тех точках пространства, в которых её потенциальная энергия — U_{pot} , меньше полной. Это следует из того обстоятельства, что кинетическая

энергия частицы $E_k = \frac{p^2}{2m} = E - U_{\text{pot}}$ не может (в классич. физике) быть отрицательной, так как в таком случае импульс будет мнимой величиной. То есть, если две области пространства разделены потенциальным барьером, таким, что $U_{\text{pot}} > E$, просачивание частицы сквозь него в рамках классической теории оказывается невозможным. В квантовой же механике, мнимое значение импульса частицы соответствует экспоненциальной зависимости волновой функции от её координаты. Это показывает уравнение Шрёдингера с постоянным потенциалом:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_{\text{pot}})\psi = 0 \quad (\text{упрощенное уравнение Шрёдингера в}$$

одномерном случае) где x — координата; E — полная энергия, U_{pot} — потенциальная энергия, \hbar — редуцированная постоянная Планка, m — масса частицы).

Если $E > U_{\text{pot}}$, то решением этого уравнения является функция:

$$\psi = A \exp\left(\frac{ix\sqrt{2m(E - U_{\text{pot}})}}{\hbar}\right) + B \exp\left(-\frac{ix\sqrt{2m(E - U_{\text{pot}})}}{\hbar}\right)$$

Пусть имеется движущаяся частица, на пути которой встречается потенциальный барьер высотой $U_0 \gg E$, а потенциал частицы до и после барьера $U_f < E$. Пусть так же начало барьера совпадает с началом координат, а его «ширина» равна a .

Для областей I (до прохождения), II (во время прохождения внутри потенциального барьера) и III (после прохождения барьера) получаются соответственно функции:

$$\begin{aligned} \psi_I &= A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx) \\ \psi_{II} &= A_2 \exp(-\chi x) + B_2 \exp(\chi x) \\ \psi_{III} &= A_3 \exp(ik(x - a)) + B_3 \exp(-ik(x - a)) \end{aligned}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_f)} \quad \chi = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$$

где

Так как слагаемое $B_3 \exp(-ik(x - a))$ характеризует отраженную волну, идущую из бесконечности, которая в данном случае отсутствует, нужно положить $B_3 = 0$. Для характеристики величины туннельного эффекта вводится коэффициент прозрачности барьера, равный модулю отношения плотности потока прошедших частиц к плотности потока упавших:

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad \text{Теперь, воспользовавшись граничными условиями, выразим сначала } A_2 \text{ и } B_2 \text{ через } A_3 \text{ (с учетом, что } \chi a \gg 1 \text{):}$$

$$A_2 = \frac{1 - in}{2} A_3 \exp(\chi a), \quad B_2 = \frac{1 + in}{2} A_3 \exp(-\chi a) \approx 0$$

$$n = \frac{k}{\chi} = \sqrt{\frac{E - U_f}{U_0 - E}} \quad \text{а затем } A_1 \text{ через } A_3: \quad A_1 = i \frac{(1 - in)^2}{4n} \exp(\chi a) A_3$$

Введем величину

$$D_0 = \frac{16n^2}{(1 + n^2)^2} = 16 \frac{(U_0 - E)(E - U_f)}{(U_0 - U_f)^2}$$

$$D \cong D_0 \exp\left(-\frac{2a\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}\right)$$

которая будет порядка единицы. Тогда:

Для потенциального барьера произвольной формы делаем замену

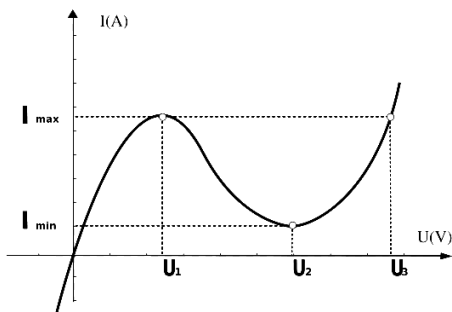
$$\frac{2a\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \Rightarrow \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx$$

где x_1 и x_2 находятся из условия $U(x_1) = U(x_2) = E$ Тогда для коэффициента прохождения через барьер получаем

$$D \cong D_0 \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right)$$

выражение

Туннельный эффект можно объяснить соотношением неопределённостей Записанное в виде: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$, оно показывает, что при ограничении квантовой частицы по координате, то есть увеличении её определённости по x , её импульс p становится менее определённым. Случайным образом неопределённость импульса Δp может добавить частице энергии для преодоления барьера. Таким образом, с некоторой вероятностью квантовая частица может проникнуть через барьер, а средняя энергия частицы останется неизменной.



Макроскопические проявления

туннельного эффект

Вольт-амперная характеристика туннельного диода. В диапазоне напряжений от U_1 до U_2 дифференциальное сопротивление отрицательно.

Обычные диоды при увеличении прямого напряжения монотонно увеличивают пропускаемый ток. В туннельном диоде туннелирование электронов добавляет горб в вольтамперную характеристику. Из-за высокой

степени легирования p и n областей, напряжение пробоя уменьшается практически до нуля. Туннельный эффект позволяет электронам преодолеть энергетический барьер в зоне перехода с шириной 50..150 Å при таких напряжениях, когда зона проводимости в n-области имеет равные энергетические уровни с валентной зоной p-области. При дальнейшем увеличении прямого напряжения уровень Ферми n-области поднимается относительно p-области, попадая на запрещённую зону p-области, а поскольку тунелирование не может изменить полную энергию электрона, вероятность перехода электрона из n-области в p-область резко падает. Это создаёт на прямом участке вольт-амперной характеристики участок, где увеличение прямого напряжения сопровождается уменьшением силы тока. Данная область отрицательного дифференциального сопротивления и используется для усиления слабых сверхвысокочастотных сигналов.

Джампер (англ. jumper) — переключатель, позволяющий выставить режим работы устройства замыканием (размыканием) нескольких контактов.

Эффект Джозефсона — явление протекания сверхпроводящего тока через тонкий слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника. Такой ток называют джозефсоновским током, а такое соединение сверхпроводников — джозефсоновским контактом.

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ, англ. STM — scanning tunneling microscope) — вариант сканирующего зондового микроскопа, предназначенный для измерения рельефа проводящих поверхностей с высоким пространственным разрешением.

Туннельная эмиссия (автоэлектронная, холодная, электростатическая, полевая), испускание электронов твёрдыми и жидкими проводниками под действием внешнего электрического поля E высокой напряжённости ($E \sim 10^7$ в/см). Т. э. была обнаружена в 1897 Р. Вудом (США). В 1929 Р. Милликен и К. Лоритсен установили линейную зависимость логарифма плотности тока j Т. э. от обратной напряжённости электрического поля: $1/E$. В 1928—29 Р. Фаулер и Л. Нордхейм дали теоретическое объяснение Т. э. на

основе туннельного эффекта. Т. э. — результат туннельного "просачивания" электронов сквозь потенциальный барьер, существующий на границе проводник — вакуум (или др. среда). Сильное электрическое поле снижает этот барьер и делает его достаточно проницаемым (то есть относительно тонким и невысоким). Распространённый термин "автоэлектронная эмиссия" отражает отсутствие энергетических затрат на возбуждение электронов, свойственных др. видам электронной эмиссии. В зарубежной литературе принят термин "полевая эмиссия" (field emission).

В предположении, что температура $T = 0$ К и вне металла в отсутствие поля на электроны действуют только силы зеркального изображения (Работа выхода) форма потенциального барьера показана на рис. 1.

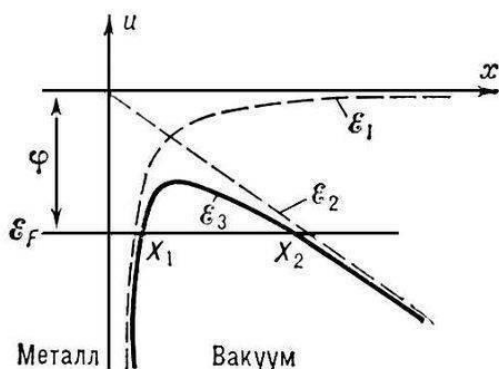


Рис.1. Потенциальная энергия электрона вблизи поверхности металла

С ростом температуры и понижением E так называемая термоавтоэлектронная эмиссия смыкается с термоэлектронной эмиссией, усиленной полем (Шотки эффектом). Энергетический спектр электронов, вылетающих из металла при Т. э., узок (рис. 2).

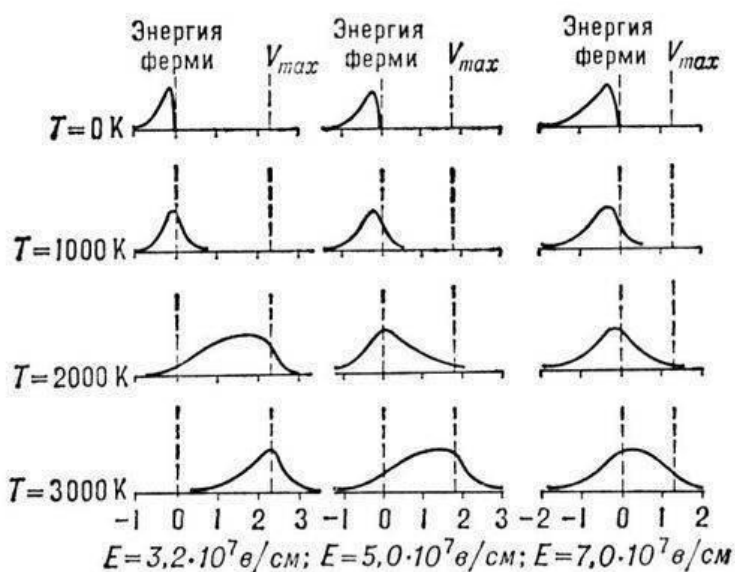


Рис. 2. Энергетический спектр электронов при туннельной эмиссии

Работа выхода
Работа выхода, энергия, затрачиваемая на удаление электрона из твёрдого тела или жидкости в вакуум. Переход электрона из вакуума в конденсированную среду сопровождается выделением энергии, равной P в. Следовательно, P в. является мерой связи электрона с конденсированной средой; чем меньше P в., тем легче происходит эмиссия электронов. Поэтому, например, плотность

тока термоэлектронной эмиссии или автоэлектронной эмиссии экспоненциально зависит от P в.

P в. зависит от кристаллографической структуры поверхности. Чем плотнее "упакована" грань кристалла, тем выше P в. j . Например, для чистого вольфрама $j = 4,3$ эв для граней $\{116\}$ и $5,35$ эв для граней $\{110\}$. Для металлов: Наименьшие P в. (2 эв) свойственны щелочным металлам (Cs, Rb, K), а наибольшие (5,5 эв) металлам группы Pt.

P в. чувствительна к дефектам структуры поверхности. Наличие на плотноупакованной грани собственных неупорядоченно расположенных атомов уменьшает j . Ещё более резко j зависит от поверхностных примесей: электроотрицательные примеси (кислород, галогены, металлы с j , большей, чем j подложки) обычно повышают j , а электроположительные — понижают.

ОПЫТЫ В КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ

Франка – Герца опыт, опыт, явившийся экспериментальным доказательством дискретности внутренней энергии [атома](#). Поставлен в 1913 Дж. [Франком](#) и Г. [Герцем](#). На [рис. 1](#) приведена схема опыта. К катоду K и сетке C_1 электровакуумной трубки, наполненной парами Hg, прикладывается разность потенциалов V , ускоряющая электроны, и снимается зависимость силы тока I от V . К сетке C_2 и аноду A прикладывается замедляющая разность потенциалов. Ускоренные в области I электроны испытывают соударения с атомами Hg в области II. Если энергия электронов после соударения достаточна для преодоления замедляющего потенциала в области III, то они попадут на анод. Следовательно, показания гальванометра Γ зависят от потери электронами энергии при ударе. В опыте наблюдался монотонный рост I при увеличении ускоряющего потенциала вплоть до 4,9 в, т. е. электроны с энергией $E < 4,9$ эв испытывали упругие соударения с атомами Hg и внутренняя энергия атомов не менялась. При значении $V = 4,9$ в (и кратных ему значениях 9,8 в, 14,7 в) появлялись резкие спады тока ([рис. 2](#)). Это определённым образом указывало на то, что при этих значениях V соударения электронов с атомами носят неупругий характер, т. е. энергия электронов достаточна для возбуждения атомов Hg. При кратных 4,9 эв значениях энергии электроны могут испытывать неупругие столкновения несколько раз. Т. о. было доказано, что энергия атома изменяется не непрерывным образом, а скачкообразно и $E = 4,9$ эв – наименьшая порция энергии, которая может быть поглощена атомом Hg, находящимся в основном состоянии. А. [Комптон](#), повторив (1922–23) Ф. – Г. о., обнаружил, что при $V > 4,9$ в пары Hg начинают испускать свет с частотой $\nu = DE/h$, где $DE = 4,9$ эв (h – [Планка постоянная](#)). Т. о., возбужденные электронным ударом атомы Hg испускают фотон с энергией 4,9 эв и возвращаются в основное состояние.

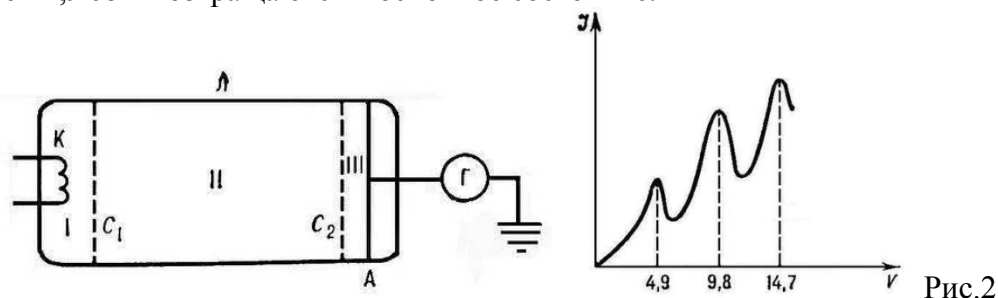


Рис. 1

Опыт Штерна — Герлаха — опыт немецких [физиков Отто Штерна](#) и [Вальтера Герлаха](#), осуществлённый в 1922 году. Опыт подтвердил наличие у [атомов спина](#) (изначально в эксперименте участвовали атомы [серебра](#), а потом и других металлов) и факт пространственного квантования направления их [магнитных моментов](#). Опыт состоял в следующем: пучок атомов серебра пропускали через сильно неоднородное магнитное поле, создаваемое мощным постоянным [магнитом](#). При прохождении атомов через это поле, в силу обладания ими магнитных моментов, на них действовала зависящая от проекции спина на направление [магнитного поля](#) сила, отклонявшая летящие между магнитами атомы от их первоначального направления движения. Причём, если предположить, что магнитные моменты атомов ориентированы хаотично (непрерывно), то тогда на расположенной далее по направлению движения атомов пластинке должна была проявиться размытая полоса. Однако вместо этого на пластинке образовались две достаточно чёткие узкие полосы ([рис. 3](#)), что свидетельствовало в пользу того, что магнитные моменты атомов вдоль выделенного направления принимали лишь два определённых значения, что подтверждало предположение [квантово-механической теории](#) о квантовании магнитного момента атомов. Позднее с аналогичными результатами были проделаны опыты для пучков атомов других металлов, а также пучков [протонов](#) и [электронов](#). Эти опыты доказали существование магнитного момента у рассмотренных

частиц и показали их квантовую природу, явив собой доказательство постулатов квантовой теории.

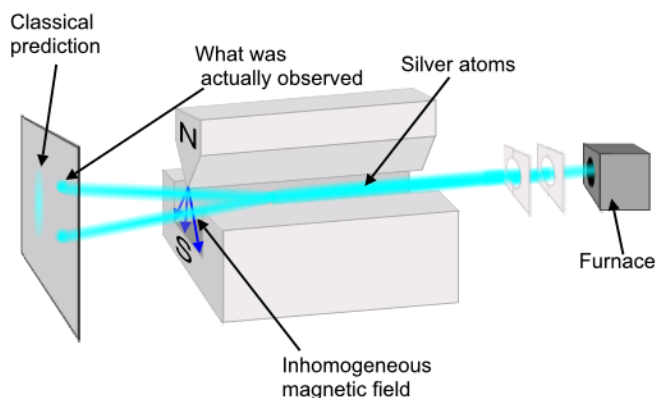
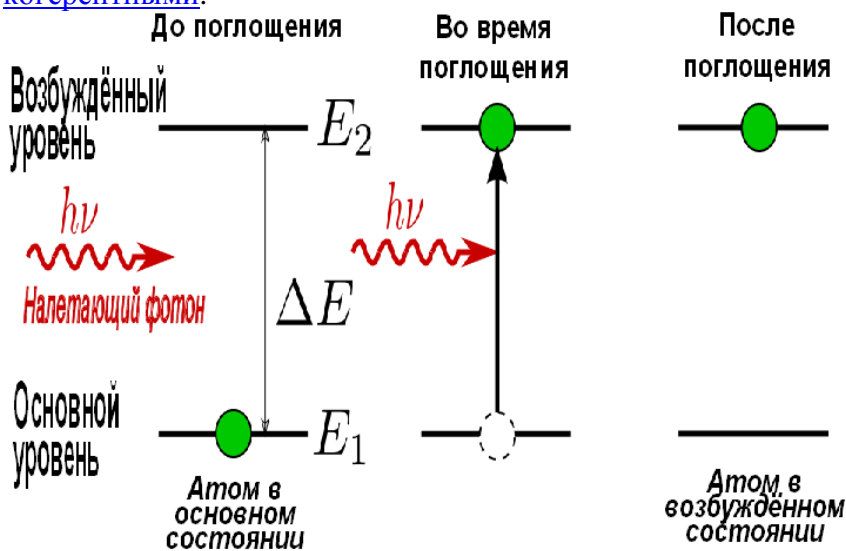


РИС. 3

Опыт Дэвиссона-Джермера — физический эксперимент по дифракции электронов, проведённый в 1927 г. американскими учёными [Клинтоном Дэвиссоном](#) и [Лестером Джермером](#). Проводилось исследование отражения электронов от [монокристалла никеля](#). Установка включала в себя монокристалл никеля, установленный на держателе. На плоскость шлифа направлялся пучок [монохроматических](#) электронов. Скорость

электронов определялась напряжением U на электронной пушке: $v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$. Под углом θ к падающему пучку электронов устанавливался [цилиндр Фарадея](#), соединённый с чувствительным [гальванометром](#). По показаниям гальванометра определялась интенсивность отражённого от кристалла электронного пучка. Вся установка находилась в вакууме. В опытах измерялась интенсивность рассеянного кристаллом электронного пучка в зависимости от угла рассеяния $0 < \theta < 90^\circ$, от азимутального угла $0 < \varphi < 360^\circ$, от скорости v электронов в пучке. Опыты показали, что имеется ярко выраженная [селективность](#) (выборочность) рассеяния электронов. При различных значениях углов и скоростей, в отражённых лучах наблюдаются максимумы и минимумы интенсивности. Условие максимума: $\Delta = 2d \sin \theta = \lambda n, n = 1, 2, \dots$ где d — постоянная крист. решётки.

Вынужденное излучение, индуцированное излучение — генерация нового [фотона](#) при переходе квантовой системы ([атома](#), [молекулы](#), [ядра](#) и т. д.) из возбуждённого в стабильное состояние (меньший [энергетический уровень](#)) под воздействием индуцирующего фотона, энергия которого была равна разности энергий уровней. Созданный фотон имеет ту же энергию, импульс, фазу и поляризацию, что и индуцирующий фотон (который при этом не поглощается). Оба фотона являются [когерентными](#).



Принцип действия лазера

Физической основой работы лазера служит явление [вынужденного \(индуцированного\) излучения](#)^[8]. Суть явления состоит в том, что возбуждённый [атом](#) способен излучить [фотон](#) под действием другого фотона без его поглощения, если [энергия](#) последнего равняется разности энергий [уровней](#) атома до и после излучения. При этом

$$E_2 - E_1 = \Delta E = h\nu$$

излучённый фотон [когерентен](#) фотону, вызвавшему излучение (является его «точной копией»). Таким образом происходит усиление [света](#). Этим явление отличается от спонтанного излучения, в котором излучаемые фотоны имеют случайные направления распространения, [поляризацию](#) и [фазу](#)

[Вероятность](#) того, что случайный фотон вызовет индуцированное излучение возбуждённого атома, в точности равняется вероятности поглощения этого фотона атомом, находящимся в невозбуждённом состоянии^[11]. Поэтому для усиления света необходимо, чтобы возбуждённых атомов в среде было больше, чем невозбуждённых (так называемая [инверсия населённостей](#)). В состоянии [термодинамического равновесия](#) это условие не выполняется, поэтому используются различные системы накачки активной среды лазера ([оптические](#), [электрические](#), [химические](#) и др.)^[12].

Первоисточником генерации является процесс спонтанного излучения, поэтому для обеспечения преобладания поколений фотонов необходимо существование [положительной обратной связи](#), за счёт которой излучённые фотоны вызывают последующие акты индуцированного излучения. Для этого активная среда лазера помещается в [оптический резонатор](#). В простейшем случае он представляет собой два [зеркала](#), одно из которых полупрозрачное — через него луч лазера частично выходит из резонатора. Отражаясь от зеркал, пучок излучения многократно проходит по резонатору, вызывая в нём индуцированные переходы. Излучение может быть как непрерывным, так и импульсным. При этом, используя различные приборы (вращающиеся [призмы](#), [ячейки Керра](#) и др.) для быстрого выключения и включения обратной связи и уменьшения тем самым периода импульсов, возможно создать условия для генерации излучения очень большой мощности (так называемые [гигантские импульсы](#))^[9]. Этот режим работы лазера называют режимом модулированной [добротности](#).

Генерируемое лазером излучение является [монохроматическим](#) (одной или дискретного набора [длин волн](#)), поскольку вероятность излучения фотона определённой длины волны больше, чем близко расположенной, связанной с уширением спектральной

линии, а, соответственно, и вероятность индуцированных переходов на этой частоте тоже имеет максимум. Поэтому постепенно в процессе генерации фотоны данной длины волны будут доминировать над всеми остальными фотонами^[12]. Кроме этого, из-за особого расположения зеркал в лазерном луче сохраняются лишь те фотоны, которые распространяются в направлении, параллельном оптической оси резонатора на небольшом расстоянии от неё, остальные фотоны быстро покидают объём резонатора. Таким образом луч лазера имеет очень малый угол расходимости^[13]. Наконец, луч лазера имеет строго определённую поляризацию. Для этого в резонатор вводят различные поляроиды, например, ими могут служить плоские стеклянные пластинки, установленные под углом Брюстера к направлению распространения луча лазера

Нелинейная оптика — раздел оптики, в котором исследуется совокупность оптических явлений, наблюдающихся при взаимодействии световых полей с веществом, у которого имеется нелинейная реакция вектора поляризации \vec{P} на вектор напряженности электрического поля \vec{E} световой волны. В большинстве веществ данная нелинейность наблюдается лишь при очень высоких интенсивностях света, достигаемых при помощи лазеров. Принято считать как взаимодействие, так и сам процесс линейными, если его вероятность пропорциональна первой степени интенсивности излучения. Если эта степень больше единицы, то как взаимодействие, так и процесс называются нелинейными. Таким образом возникли термины линейная и нелинейная оптика.

Появление **нелинейной оптики** связано с разработкой лазеров, которые могут генерировать свет с большой напряженностью электрического поля, соизмеримой с напряженностью микроскопического поля в атомах.

Основные причины, вызывающие различия в воздействии излучения большой интенсивности от излучения малой интенсивности на вещество:^[14]

При большой интенсивности излучения главную роль играют многофотонные процессы, когда в элементарном акте поглощается несколько фотонов. При большой интенсивности излучения возникают эффекты самовоздействия приводящие к изменению исходных свойств вещества под влиянием излучения.

К **нелинейной оптике** относят целый ряд физических явлений:

Многофотонные процессы (процессы с изменением частот)

Генерация второй гармоники, или удвоение частоты света, являющееся генерацией света с удвоенной частотой и уменьшенной вдвое длиной волны;

Сложение частот света — генерация света с частотой, равной сумме частот двух других световых волн. Удвоение частоты является частным случаем данного явления;

Генерация третьей гармоники — генерация света с утроенной частотой. Обычно является комбинацией двух предыдущих явлений: сначала происходит удвоение частоты, а затем сложение частот исходной волны и волны с удвоенной частотой;

Спонтанное параметрическое рассеяние — уменьшение частоты света при его прохождении через нелинейный оптический кристалл;

Электрооптическая поляризация (оптическое выпрямление) — процесс генерации постоянного электрического поля при прохождении света через вещество;

Самоиндуцированная прозрачность - явление резкого уменьшения потерь энергии при прохождении ультракоротких монохроматических импульсов излучения через резонансную среду.

Другие нелинейные явления

Оптический эффект Керра-зависимость показателя преломления от интенсивности света;

Самофокусировка, Самодефокусировка;

Частотная самомодуляция света сверхкоротких световых импульсов;

Генерация ортогонально поляризованной волны — эффект возникновения волны с поляризацией, перпендикулярной к вектору поляризации \vec{E} исходной волны;

Двухфотонное поглощение — одновременное поглощение двух фотонов, передающих свою суммарную энергию одному электрону;

Множественная фотоионизация, квазисовременный процесс выбивания множества связанных электронов одним фотоном; Акустооптика. Показатель преломления в акустооптических системах меняется под действием распространяющихся в среде ультра- и гиперзвуковых акустических волн. Эффект находит применение в акустооптических модуляторах; Магнитооптический эффект Фарадея;

Одним из наиболее часто используемых процессов с изменением частот является **генерация второй гармоники**. Это явление позволяет преобразовать выходное излучение лазера Nd:YAG лазера (1064 нм) или лазера на сапфире, легированного титаном (800 нм) в видимое, с длинами волн 532 нм (зеленое) или 400 нм (фиолетовое), соответственно.

На практике для реализации удвоения частоты света в выходной пучок лазерного излучения устанавливают нелинейный оптический кристалл, ориентированный строго определенным образом. Обычно используют кристаллы β -бората бария (ВВО), KH_2PO_4 (KDP), KTiOPO_4 (КТР) и ниобат лития LiNbO_3 . Эти кристаллы имеют необходимые свойства, удовлетворяющие условию синхронизма, имеют особую кристаллическую симметрию, а также являются прозрачными в данной области спектра и устойчивы к лазерному излучению высокой интенсивности. Существуют органические полимерные материалы, которые, возможно, в будущем смогут вытеснить часть кристаллов, если будут более дешевы в изготовлении, более надежны или будут требовать более низких напряженностей полей для возникновения нелинейных эффектов.

Теория. Большое количество явлений нелинейной оптики могут быть описаны как процессы со смешением частот. Если наведенные дипольные моменты в веществе немедленно отслеживают все изменения приложенного электрического поля, то диэлектрическая поляризация (дипольный момент на единицу объема) $P(t)$ в момент времени t в среде может быть записан в виде ряда по степеням E :

$$P(t) \propto \chi^{(1)} E(t) + \chi^{(2)} E^2(t) + \chi^{(3)} E^3(t) + \dots$$

Здесь, коэффициент $\chi^{(n)}$ — нелинейная восприимчивость среды n -го порядка. Для любого трёхволнового процесса член второго порядка является необходимым. Если среда обладает симметрией относительно инверсии, то этот член точно равен нулю.