

3. ФІЗИЧНІ АСПЕКТИ МІКРОЕЛЕКТРОНІКИ

Уже в шкільній програмі з фізики і хімії вводяться основні положення квантової механіки, які пов'язані, наприклад, з дискретністю випромінювання і поглинання світла, фотоефектом, корпускулярно-хвильовим дуалізмом частинок, співвідношенням невизначеностей; подаються основні поняття будови атома й атомних спектрів; згадується принцип Паулі, що пояснює структуру електронних оболонок і валентність атомів, а також розміщення атомів хімічних елементів у періодичній системі Менделєєва. Школярі ознайомлюються з основними властивостями металів, діелектриків та напівпровідників і напівпровідникових приладів.

Фізика *конденсованого стану*, тобто фізика твердого тіла і нанофізика, являють собою завершальні частини курсу загальної фізики і використовують знання, отримані в попередніх розділах фізики. Тому перед ознайомленням з фізичними ефектами, які застосовуються у мікроелектроніці й наноелектроніці, студентам необхідно звернути особливу увагу на порівняння основних уявлень класичної механіки про будову речовини з квантово-механічним підходом до цього питання.

З метою мотивації студентів спеціальності «Мікроелектроніка і наноелектроніка» до більш ретельного вивчення основних фізичних курсів на основі шкільних програм наведено найважливіші поняття й етапи розвитку фізичної науки, які стали визначальними для створення сучасної мікроелектроніки і майбутньої наноелектроніки.

3.1. Сучасна фізична картина світу

Місце *класичної механіки* в загальній фізиці (вивчається студентами на першому курсі) і *квантової механіки* (вивчається на другому курсі) ілюструється на рис. 3.1. Видно, що класична механіка – це діапазон малих швидкостей U (порівняно зі швидкістю світла c), а також діапазон малих значень відношення *постійної Планка* \hbar до *моменту кількості матеріальної частинки* S .



Рис. 3.1. Схематичне зображення зв'язку різних галузей фізики

Перші уявлення про квантову природу мікрооб'єктів і процесів виник-

ли під час вивчення закономірностей теплового випромінювання. Було показано, що коректна теорія теплового випромінювання, доведена експериментально у всьому діапазоні довжин хвиль, може бути побудована лише в припущенні, що світло *випромінюється* речовиною *дискретно*, тобто окремими порціями – *квантами*. Це припущення називають *гіпотезою Планка* – енергія світлового кванта E пропорційна його частоті ν , тобто: $E = h\nu$. За роботи в галузі теплового випромінювання Планк був визнаний гідним Нобелівської премії (1918 р.).

Постійна Планка h ($h = 2\pi\hbar = 6,6 \cdot 10^{-27}$ ерг \cdot с = $6,6 \cdot 10^{-34}$ Дж \cdot с, а її фізична розмірність означає: *енергія \times час = довжина \times імпульс = момент кількості руху*) належить до *фундаментальних* фізичних констант – так само, як і постійна Больцмана k_B , заряд e і маса m_e електрона. Постійну Планка застосовують через відмову від класичних уявлень – разом із квантовою (хвильовою) механікою. При цьому формальний перехід від *квантової механіки* до *класичної механіки* Ньютона завжди можливий, якщо покласти $h = 0$.

Розмірність S виявляється такою самою, як і розмірність постійної Планка h , і тому обидві шкали на рис. 3.1 безрозмірні. Таким чином, S – це *момент кількості руху* – фізична величина, що має розмірність добутку енергії на час; вона є однією з найважливіших динамічних характеристик руху частинок і їх систем як у класичній, так і у квантовій механіці.

Фізика конденсованих середовищ (зокрема, фізика твердого тіла) ґрунтується на класичній і квантовій механіці (рис. 3.1). Однак для опису одного з важливих розділів фізики твердого тіла – магнетизму – доводиться залучати поняття релятивістської квантової механіки. Магнетизм, що у статистиці виглядає просто як механічне притягання або відштовхування речовин у магнітному полі, має досить складну фізичну природу. Класична фізика принципово не може пояснити магнетизм. Це квантове за своєю природою явище виявляється також і релятивістським.

Релятивістська квантова механіка потрібна передусім для розуміння фізики елементарних частинок.

Для загальної освіти та ерудиції студентам, що спеціалізуються в галузі електроніки, необхідні більш детальні уявлення про взаємозв'язок різних розділів фундаментальної фізики. На рис. 3.2 показано так званий «куб» сучасної фундаментальної фізики. Як видно з цього рисунка, розвиток фізики почався з *механіки Ньютона*. Потім у *ньютонівській теорії гравітації* з'явилася фундаментальна гравітаційна постійна γ , але оскільки сили тяжіння в мільярди разів слабкіші від електричних взаємодій, то у фізиці твердого тіла силами гравітації нехтують. У *спеціальній теорії відносності*

Ейнштейна з'явилася ще одна фундаментальна константа – швидкість світла у вакуумі c . Цей параметр досить важливий і для фізики конденсованих середовищ (що включає і фізику твердого тіла), оскільки його використовують для опису взаємодії кристалів з електромагнітними хвилями. Символом *квантової механіки* є постійна Планка h . Для *релятивістської квантової механіки*, що є результатом поєднання теорії відносності і квантової механіки, рівноцінно значущі обидва фундаментальні параметри: h і швидкість світла c .

Інші галузі фізики – «*Загальна теорія відносності*», «*Квантова теорія гравітації*» і, особливо, очікувана в майбутньому «*Загальна теорія фізичних взаємодій*» – відокремлені від фізики конденсованих середовищ (рис. 3.2), на якій ґрунтується електроніка. Описуючи властивості речовини, фізика твердого тіла широко оперує не тільки фундаментальними константами h і c , але і параметрами електрона – його зарядом e , магнітним спіновим моментом μ_B і масою m_e .

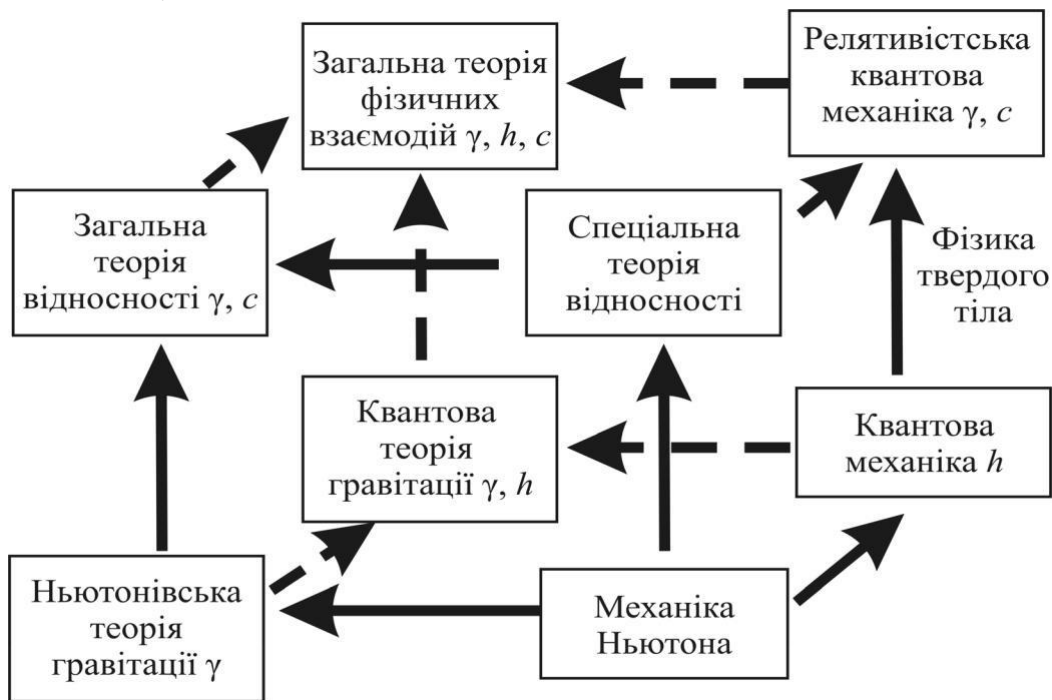


Рис. 3.2. Зв'язок різних галузей фізики (стрілками показано напрям розвитку галузей)

Поділ фізичних констант на фундаментальні й похідні параметри є довільним. Зазвичай до фундаментальних належать такі константи, що входять у формули і мають зрозумілий фізичний зміст. Примітно, що згадані вище константи (γ , h , c , e , μ_B , m_e) мають *розмірність*, залежать від вибору системи одиниць і до-вільно обраних стандартних еталонів (довжини, часу, маси, заряду, магнітного моменту і т.ін.). Тому фізиків давно цікавить можливість опису природи деяки-ми безрозмірними параметрами (див. підрозд. 3.7).

3.2. Частинки, хвилі та їх дуалізм

Тверді тіла складаються з атомів, а атоми – з елементарних частинок: *електронів, протонів і нейтронів*. Частинка є елементарною, якщо її не можна описати як складну систему, що складається з інших, більш елементарних частинок. Якщо не враховувати гіпотезу про «кварки», то складові атома – електрони, протони і нейтрони – дійсно елементарні. Ці частинки, що складають атом, мають власний магнітний момент. Їхні властивості описуються як класичною, так і квантовою механікою.

Натепер, особливо в зв'язку з початком функціонування великого адронного колайдера, спостерігається підвищений інтерес до фізики елементарних частинок.

*Адронний колайдер – прискорювач заряджених частинок на зустрічних пучках, призначений для розгону протонів і важких іонів (іонів свинцю), побудований у науково-дослідному центрі Європейської ради ядерних досліджень. Адроні (від грец. hadros – сильний) – клас елементарних частинок, які **сильно взаємодіють** і не є істинно елементарними. Адрони поділяються на дві основні групи відповідно до їхньої кваркової сполуки: **мезони**, що складаються з одного кварка і одного антикварка, і **баріони**, що складаються з трьох кварків. З баріонів побудовано основну частину речовини, що спостерігається нами: нуклони складають ядро атома і являють собою протон і нейтрон. До баріонів належать також численні **гіперони** – більш важкі і нестабільні частинки, одержувані на прискорювачах елементарних частинок. Адронний колайдер допоможе підтвердити теорії походження і будови Всесвіту (підрозд. 3.7).*

У класичній механіці базовим об'єктом дослідження є *матеріальна точка*, що рухається по певній траєкторії. Вона задається початковими умовами (масою, координатами, швидкістю), а також силами, що діють на матеріальну точку. Атомна структура речовини, на перший погляд, відповідає цьому основному образу класичної механіки. Матеріальні точки – це атоми, електрони, протони – тобто ті частинки, які варто вважати елементарними під час розгляду атома.

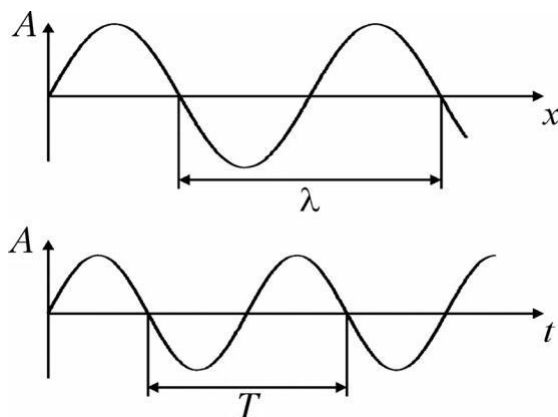
У класичній фізиці властивості твердих тіл можна розуміти як властивості сукупностей частинок (матеріальних точок), що взаємодіють між собою і рухаються по відповідних траєкторіях. При цьому мають бути відомі *сили взаємодії* між ними (відзначимо, що і квантова механіка не виключає існування сил взаємодії).

Таким чином, основою класичного механічного світогляду є матеріаль-

на точка – частинка, про яку можна точно знати, де вона перебуває в певний момент часу і з якою швидкістю рухається.

Однак класичний світогляд не обмежується поняттям матеріальної точки. Відкриття радіохвиль і з'ясування хвильової природи світла показали, що матерія існує не тільки у формі *частинок* речовини, але й у вигляді *хвиль*. Хвиля – це просторово-часовий періодичний процес.

Просторовою характеристикою елементарної хвилі є її довжина λ , вимірювана в метрах (м). Часовою характеристикою хвилі є період коливальності T , вимірюваний у секундах (с). Однак у фізиці твердого тіла для характеристики хвилі використовують *обернені* за розмірністю величини: колову частоту хвилі $\omega = 2\pi/T$ (радіан·с⁻¹) і хвильовий вектор $k = 2\pi/\lambda$ (м⁻¹). На рис. 3.3 часове і просторове уявлення про найпростішу



одновимірну хвилю штучно розділені.

Рис. 3.3. Графіки просторового і часового уявлень про одновимірну хвилю: A – амплітуда хвилі

У класичній фізиці завжди зрозуміло, що саме коливається. У випадку звичайних механічних коливань (наприклад, звукових хвиль) коливальний рух роблять частинки речовини (газу, рідини, твердого тіла). Коли ж ідеться про електромагнітні коливання, то звичні класичні уявлення не придатні, оскільки ніщо, що не має маси, не може коливатися.

Електромагнітна хвиля (у найпростішому вигляді – це плоска хвиля визначеної частоти) являє собою ще одну форму існування матерії – *електромагнітне поле*. При цьому елементарною формою, з якої конструюються всілякі електромагнітні поля, нескінченно протяжна в просторі і в часі хвиля.

Із хвилею також пов'язані поняття двох швидкостей. Перша – це швидкість переміщення фази хвилі – *фазова швидкість* $U_{\text{фаз}} = \omega/k$, Фазова швидкість характеризує структуру хвилі, але не визначає безпосередньо швидкості перенесення енергії хвилі.

Друга швидкість – це швидкість перенесення енергії. Її називають *груповою швидкістю*, оскільки саме із цією швидкістю поширюється хвильовий пакет (група хвиль). *Групова швидкість* $U_{\text{гр}} = d\omega/dk$. Рівність швидкостей $U_{\text{фаз}} = U_{\text{гр}}$ означає, що в тому середовищі, де поширюється хвиля, дисперсії не відбувається, тобто частота ω *прямо пропорційна* хвильовому вектору. Саме так поширюються електромагнітні хвилі у вакуумі: $U_{\text{фаз}} = U_{\text{гр}} = c = 3 \cdot 10^8$ м/с (c – швидкість світла). Якщо перейти від частоти до енергії

хвилі $E = \hbar\omega$ і від хвильового вектора до імпульсу $p = \hbar k$, отримаємо залежність енергії «хвилі-частинки» від її імпульсу $E(p)$, яку також називають *дисперсією*, що є найважливішою характеристикою хвильового процесу.

На відміну від вакууму дисперсія неодмінно спостерігається під час поширення електромагнітної хвилі в будь-яких частково прозорих для неї твердих тілах. Електромагнітні хвилі в твердих тілах, по-перше, сповільнюються: $U_{\text{гр}} \text{ і } U_{\text{фаз}} < c$, а по-друге, ці швидкості стають залежними від хвильового вектора за різними функціональними законами. У підсумку залежність $\omega(k)$ стає не прямо пропорційною, тобто спостерігається дисперсія хвиль.

Сповільнення електромагнітних хвиль у частково прозорих твердих тілах пояснюється тим, що ці хвилі збуджують коливання зв'язаних електричних зарядів (електронів, іонів) і такі коливання «несуть у собі» електромагнітну хвилю. Але тепер хвиля супроводжується просторовим коливальним зміщенням матеріальних частинок з певною *інертною масою* (якої не було у вакуумі) і саме це уповільнює перебіг електромагнітної хвилі в об'ємі твердого тіла. Цікаво також звернути увагу на те, що період коливань електромагнітної хвилі залишається таким же, а швидкість зменшується. Наслідком цього є *зменшення довжини електромагнітної хвилі* під час поширення в об'ємі твердого тіла.

На частотах $10^{16} - 10^{17}$ Гц і вище (рентгенівські хвилі й гама-промені) ніякі електричні заряди через їх інерцію не можуть коливатися за рахунок енергії хвилі і, таким чином, тверді тіла стають цілком електромагнітно прозорими.

У повному обсязі взаємодія електромагнітних хвиль з твердими тілами вивчається у курсах «*Фізика твердого тіла*», «*Фізика діелектриків*», «*Фізика напівпровідників*».

На перший погляд поняття «хвиля» і «частинка» – несумісні, взаємно виключають одне одного. Дійсно, за класичними уявленнями частинка – це щось мале, що перебуває в кожний момент часу у певному місці і рухається з певною швидкістю. Навпаки, хвиля – це щось таке, що поширюється і заповнює весь простір. Проте квантова механіка для *малих частинок*, тобто в діапазоні великих відношень \hbar/S (див. рис. 3.1) явно свідчить про подвійність (дуалізм) прояву властивостей як частинок, так і хвиль.

Інакше кажучи, мікрооб'єкти мають властивості і частинок, і хвиль. Далі розглядаються саме *хвильові властивості частинок*.

Строге пояснення властивостей мікрооб'єктів і їхніх взаємодій описується в квантовій механіці винятково математичним способом і звичайно не є наочними. Проте квантова (хвильова) механіка дозволяє зберегти уявлен-

ня про частинки як про «згустки» речовини, якщо ввести їх в загальну картину хвиль, що відповідає цим «згусткам».

Наприклад, вільний рух електрона у просторі можна уявити як поширення *хвильового пакета* (рис. 3.5). У деякій точці хвильового поля перебуває і сам електрон, але там, де немає хвилі, імовірність знайти електрон близька до нуля. При цьому висота хвилі (амплітуда) характеризує імовірність знайти частинку в певній точці, якщо точніше – імовірність пропорційна квадрату амплітуди хвилі.

Такими є сучасні уявлення про природу хвиль, що супроводжують частинки. Розраховуючи хвильові ймовірності для певної частинки за різних умов, можна визначити ймовірність знайти частинку в тій або іншій ділянці простору.

Однак хвильовий пакет у цілому характеризує лише вільний (або майже вільний) рух частинки, наприклад, рух «вільного» електрона в металі або напівпровіднику.

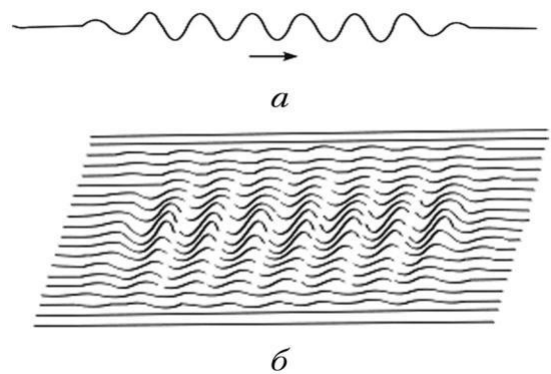


Рис. 3.5. Хвильовий пакет: *a* – одновимірне подання; *б* – двовимірне подання

3.3. ФОТОНИ

Крім частинок, які мають заряд, масу, спіні (електрони, протони і нейтрони), хвильова природа яких для опису властивостей твердих тіл і наноструктур, велику роль відіграють **фотони** – кванти енергії електромагнітного поля.

Під час побудови теорії зовнішнього фотоефекта Ейнштейн показав, що світло не тільки випромінюється і поглинається квантами, але й *поширюється* як потік особливих частинок (фотонів), що містять у собі дискретну порцію енергії, що дорівнює $h\nu$ ($\nu = \omega/2\pi$ – частота хвилі, Гц). На підставі квантових уявлень про світло Ейнштейн пояснив не тільки фотоефект, але й інші фізичні явища, що не піддавалися опису з погляду хвильової (електромагнітної) теорії світла (Нобелівська премія, 1921 р.).

Подвійність природи світла доведено значно раніше, ніж відкрито хвильові властивості електрона. Перші припущення про дискретну структуру світла були сформульовані не тільки тому, що це відповідало експериментальним фактам, але й тому, що протягом декількох століть серед фізиків точилася дискусія між прихильниками *корпускулярної теорії* світла та прихильниками *хвильової теорії* світла. Зрештою хвильова теорія змогла пояснити як прямолінійне поширення світла, так і закони його переломлення та

відбиття. На користь хвильової теорії свідчили експерименти з інтерференції і дифракції. Створення теорії електромагнетизму остаточно підтвердило хвильову природу світла.

Однак єдиною можливим поясненням законів випромінювання абсолютно чорного тіла (як і фотоефекту) було визнання саме *корпускулярних* властивостей світлових хвиль – *фотонів*, незвичайних частинок, що *не мають маси спокою*. Можна показати, що закон Кулона – порівняно повільне зниження електричної взаємодії з відстанню – зобов'язаний саме нульовій масі спокою фотона.

Відомо, що електростатична (кулонівська) взаємодія заряджених частинок зумовлює дуже великі сили (порівняно з гравітаційною взаємодією). Розглянемо взаємодію між двома зарядженими частинками q_1 і q_2 . Якщо друга частинка вилучена «на нескінченність», то перша частинка створює навколо себе електричне поле, потенціал якого ϕ пропорційний q_1/r . Якщо наблизити віддалену частинку із зарядом q_2 на відстань r , то на неї буде діяти сила, пропорційна q_1q_2/r^2 і напрямлена від q_1 , якщо заряди одного знака, або до q_1 , якщо заряди різних знаків.

Електричне поле вводиться поняттям «потенціал». На існування поля вказує той факт, що в точці, де перебуває електричний заряд, є деяка особливість. Фундаментальне пояснення взаємодій електричних зарядів полягає в доведенні потреби поняття «поле» для того, щоб узгодити взаємодію зарядів із максимально можливою швидкістю поширення будь-яких збуджень та уникнути суперечності з теорією відносності.

Формула для сили Кулона $F = q_1q_2/(4\pi\epsilon_0r^2)$, де $4\pi\epsilon_0$ – коефіцієнт, що узгоджує розмірності величин у системі СІ, відповідає тому факту, що швидкість світла c – максимальна швидкість, з якою може бути переданий будь-який сигнал. Якби сила залежала просто від відстані між зарядженими частинками, то зсув однієї з частинок (у розглядуваному випадку заряду q_2) має був би «миттєво» вплинути на стан іншої частинки (q_1). Однак це суперечить фундаментальному принципу теорії відносності – обмеженій швидкості поширення сигналу.

Відповідно до фізичного змісту поняття «поле» на заряджену частинку, що перебуває в певній точці простору, діє сила, яка відповідає напруженості електричного поля в цій точці. Якщо один із зарядів, що створюють поле, переміститься, то й поле поблизу його зміниться, і від нього біжуча *хвиля збурювання* тільки через час r/c досягне другого заряду. Таким чином, електромагнітне поле забезпечує *близькодію*, яка спостерігається в природі.

У класичній фізиці взаємодія заряджених частинок відбувається за схемою:

частинка \rightarrow електромагнітне поле \rightarrow частинка.

Відповідна квантова схема така:

частинка \rightarrow фотон \rightarrow частинка,

тобто заряджена частинка, переміщуючись, породжує фотон, який поглинається іншою частинкою, що й зумовлює силу взаємодії частинок.

Цікаво також відзначити, що закон Кулона (який стверджує, що сила взаємодії зарядів обернено пропорційна квадрату відстані між зарядженими частинками) – наслідок того факту, що маса фотона дорівнює нулю. І саме тому, що маса спокою фотона нульова ($m_{\text{ф}} = 0$), його швидкість дорівнює швидкості світла.

Фотон як електромагнітна хвиля виявляє в ряді випадків властивості частинки. Характеристикою корпускулярних властивостей об'єкта є імпульс, а характеристикою хвильових властивостей – хвильовий вектор. Вони зв'язані співвідношенням де Бройля: $p = \hbar k$, причому це співвідношення можна читати і праворуч, і ліворуч: $\hbar k = p$. Корпускулярні властивості хвилі виявляються, наприклад, у тому, що хвиля з частотою ω не може мати енергії, меншої ніж $\hbar\omega$ (згідно з класичним уявленням енергія хвилі пропорційна квадрату її амплітуди і може бути як завгодно мала).

Фотон – електрично і магнітно нейтральна частинка. Змінити його енергію або траєкторію електричними і магнітними полями у вакуумі неможливо. Тобто фотон можна або «породити» (випромінюванням нагрітого тіла, люмінесценцією і т.ін.), або «вбити» (під час поглинання). Фотони не взаємодіють між собою. Саме це дає змогу створювати монохроматичні промені будь-якої густини (наприклад, лазерні промені).

Спін фотона – цілий, він дорівнює одиниці, оскільки фотон (на відміну від електрона) за законом енергетичного розподілу належить до бозонів (за іменем індійського фізика Бозе). При цьому фотон може перебувати тільки в двох спінових станах: ± 1 . Два спінові стани фотона означають праву і ліву колові поляризації хвилі, що мають значення для розуміння магнітооптичних ефектів.

Енергія фотона тим більша, чим більший його імпульс p , тобто чим менша довжина електромагнітної хвилі λ , оскільки імпульс $p = \hbar k = 2\pi\hbar/\lambda = h/\lambda$.

Закон дисперсії для фотона, тобто зв'язок між його енергією й імпульсом, виражається простою формулою: $E = cp = hc/\lambda$.

Цей факт з погляду класичної фізики фундаментально відрізняє фотон

від частинки з масою спокою m (для якої закон дисперсії: $E = p^2/2m$). Однак з *релятивістської* формули для енергії $E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$ випливає, що за великих імпульсів (тобто, коли $p \gg mc$), як і для будь-якої частинки, що рухається зі швидкістю світла, енергія $E \approx cp$. Тому й фотон *схожий* на частинку, але тільки не на звичайну – «повільну», а на *релятивістську*.

Експериментальні засади електромагнітної теорії незаперечні, тому хвильова теорія світла залишається непохитною. Вона була лише доповнена переконливо обґрунтованою квантовою теорією світла. Таким чином, визнано, що *світло має подвійну (корпускулярно-хвильову) природу*.

Величина k , означена в класичній механіці як *хвильовий вектор*, широко використовується і в квантовій механіці. Напрямок хвильового вектора збігається з напрямком вектора імпульсу p фотона, тобто хвильовий вектор напрямлений убік поширення світлової хвилі. Модуль хвильового вектора k називається також *хвильовим числом*.

Де Бройль показав, що хвильові властивості притаманні не лише фотонам, але й будь-яким частинкам речовини. При цьому довжина хвилі λ , що відповідає частинці (власній довжині хвилі), називається *хвилею де Бройля* і визначається формулою $\lambda = h/p = h/mu$, де m – маса частинки; u – її швидкість.

Гіпотеза про корпускулярно-хвильовий дуалізм набула універсального характеру і була використана Шредінгером для *основного рівняння квантової механіки* — *рівняння Шредінгера* (Нобелівська премія, 1933 р.).

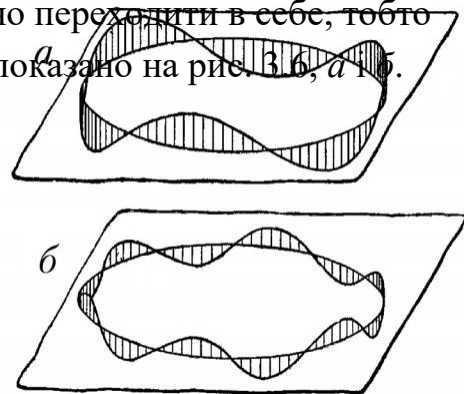
3.4. Електрони

Коли частинка змушена перебувати в обмеженому просторі (як, наприклад, електрон в атомі), то її хвильові властивості описуються трохи інакше. У цьому випадку вводиться поняття *стаціонарного стану* – такого стану, у якому перебуває частинка, якщо квантова система (наприклад, атом) у цілому залишається незмінною із плином часу. Якщо частинка (наприклад, електрон в атомі) перебуває в стаціонарному стані, тобто не втрачає і не одержує енергії, то довжина і форма її хвилі з часом не змінюється. Тому можливі значення повної енергії частинки не є довільними. Отже, електрон, утримуваний, наприклад, в атомі силою його притягання до ядра, може мати значення енергії лише з певного набору.

Навпаки, відповідно до *класичної механіки* електрон, що обертається навколо ядра, може мати будь-яку енергію, і, отже, довільний (зокрема і як завгодно малий) радіус обертання. Але зі зменшенням радіуса обертання зменшується і момент кількості руху, і разом з ним орбітальний магнітний момент. Звідси можна було б вважати, що й орбітальний магнітний момент

може бути довільним, що не відповідає дійсності. Крім того, різні атоми того самого елемента могли б відрізнятися один від одного, а вони нерозрізнені. З цієї і інших причин *класичні закони руху незастосовні до опису властивостей елементарних частинок.*

У найпростішій моделі Бора вважається, що електрон змушений рухатися по колу навколо атома. Для електрона всі ділянки такого кола однакові і відомо лише те, що він перебуває на периметрі кола; більш детальна локалізація електрона не визначається. У цьому випадку *хвиля імовірності* перебування електрона має зберігати однакову форму по всьому колу. Для цього, обійшовши все коло, хвиля має безперервно переходити в себе, тобто вкладатися на довжині кола *ціле число раз*, як показано на рис. 3.6, а і б. Саме ці *дозволені стани* при-



водять до певного набору допустимих значень швидкості електрона, тобто до набору значень його енергії.

Модель Бора (рис. 3.6) є найпростішим припущенням хвильової механіки про розташування електронів в атомі. Більш точний аналіз показує, що електрон може перебувати не

Рис. 3.6. Частинка, що рухається по колу: а і б – дозволені хвилі

тільки на периметрі кола, але й у всьому просторі атома з деякою імовірністю.

Оскільки електрон має негативний електричний заряд, то він притягується до позитивно зарядженого ядра атома, тому імовірність того, що електрон у деякий момент часу перебуває поблизу ядра, вища за імовірність знайти його на значному віддаленні від ядра.

Амплітуду хвилі імовірності перебування електрона показано на рис. 3.7, а – з максимумом поблизу ядра. Для наочності можна вважати, що електрон швидко рухається по цій стаціонарній хвилі, а її амплітуда вказує на відносні проміжки часу, протягом яких

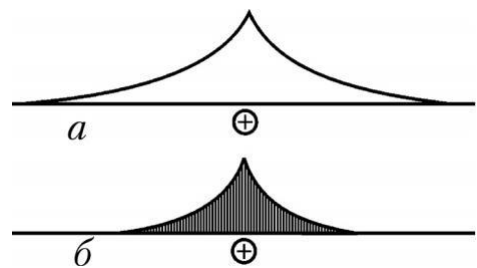


Рис. 3.7. Амплітуда (а) і хвильова функція (б) – щільність імовірності перебування електрона

перебуває у тому або іншому місці. Квадрат атомі водню амплітуди хвильової функції імовірності – хвиля щільності імовірності перебування електрона – показано на рис. 3.6, б. Квантова

механіка не передбачає визначення траєкторії електрона: є тільки формула для хвильової функції і для хвилі імовірності та засоби для її використання.

Отже, реальна картина стану електрона в атомі виявляється складні-

шою, ніж просте обертання його по цілком визначеній орбіті навколо ядра, як це показано на рис. 3.6. Замість цього положення електрона в атомі описується за допомогою *хвилі ймовірності*, що концентрується поблизу ядра і не змінюється в часі. Таким чином пояснюється той факт, що електрон в атомі не випромінює енергії у вигляді електромагнітних хвиль – річ у тім, що *хвиля щільності ймовірності* перебування електрона в атомі *стаціонарна, незмінна в часі*.

Наочний формальний опис властивостей частинок у квантовій механіці виконано за допомогою комплексної хвильової функції Ψ . Ця функція – не по-ле, тобто, якщо Ψ -функція відмінна від нуля в якійсь точці, то це не означає, що в цій точці на якусь іншу частинку діє якась сила. Взагалі простої інтерпретації Ψ -функція не має (такої, наприклад, інтерпретації як потенціал електричного поля ϕ , градієнтом якого є напруженість електричного поля). Однак *квадрат модуля* хвильової функції $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$ добре інтерпретується – це *ймовірність* знайти частинку в тій або іншій точці простору, і, що найважливіше, цю *ймовірність* можна *експериментально визначити*. Взагалі вигляд Ψ -функції неодно-значний, її достовірність визначається відповідністю $|\Psi|^2$ результатам експериментального вимірювання.

Імовірнісний зміст хвильової функції змінює стиль опису «взаємодій» у квантовій механіці порівняно з класичною механікою, відповідно якої означення початкових умов і сил обумовлює точний розрахунок еволюції системи. У квантовій механіці стан системи описується зовсім в інших термінах. Через *співвідношення невизначеності* або, що те саме, через хвильові властивості частинок стан системи не можна описати з тим ступенем точності, який можливий у класичній механіці. Закономірності хвильової механіки формулюються у ймовірнісних термінах, і це обумовлено співвідношенням невизначеності (підрозд. 3.6).

3.5. Спін

Крім заряду й маси, частинки мають власний механічний магнітний і магнітний моменти – *спін*. У перекладі з англійської мови слово *spin* означає обертання (або веретено). Таким чином, частинки – електрон, протон і нейтрон – не можна уявляти просто «нерухомими кульками». Якщо користуватися «класичними» уявленнями, то ці частинки були б «вічно обертовими кульками» (рис. 3.8). При цьому швидкість їх обертання змінити неможливо, оскільки те, що спрощено, трактується як «обертання», – це *внутрішня властивість* самих частинок. Електрон або протон не можуть змінити величин ні

свого спіну, ні своєї маси, ні заряду. У цьому виявляється *елементарність* цих частинок (хоча вони можуть брати участь у перетвореннях).

Показані на рис. 3.8 «класичні» уявлення про спін є крайнім спрощенням, наприклад, вони суперечать теорії відносності. Насправді спін – це не наслідок просторового обертання, а деяка властивість елементарної частинки, що визначає, зокрема, її поведінку в «колективі» навколишніх частинок. Проекції спінового моменту для одних частинок можуть бути тільки цілими, а для інших – тільки півцілими. Нульовий спін зараховують до цілих спінів.

З «обертанням» частинок має бути пов'язаний механічний момент кількості руху S . Квантова механіка дає точний вираз для механічного моменту: $S = [s(s + 1)]^{1/2}\hbar$, де s – *спінове число* або *просто спін*.

Фундаментальні частинки – електрони, протони, нейтрони – мають спін, що дорівнює $1/2$. За простим розрахунком механічного моменту для цих частинок $S \approx 0,86\hbar$.

Як було показано Діраком, частинка зі спіном $1/2$, електричним зарядом e , масою m_e має магнітний момент $\mu_B = e\hbar/2m_e$.

Цю величину називають *магнетон* *Бора* і для електрона він становить $9,3 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл. Значення магнітного моменту електрона взято за одиницю.

Мати магнітний момент означає бути джерелом магнітного поля. Оскільки електрон має електричний заряд e , то він є джерелом електричного поля. У зв'язку з «обертанням» зарядженого електрона (що може умовною мовою класичної фізики вважатися «кільцевим струмом») він є також і джерелом магнітного поля. Це ще одне свідчення єдності електричних і магнітних полів. Закон взаємодії двох мікроскопічних магнітиків той самий, що й для звичайних макроскопічних магнітів, і є формальним аналогом взаємодії електричних зарядів. За умови, що магнітні диполі μ_1 і μ_2 рознесені на відстань (велику порівняно з їх розмірами), сила F_M , що діє між двома магнітиками (магнітними диполями) обернено пропорційна четвертому степеню відстані між ними і прямо пропорційна добуткові магнітних моментів: $F_M \sim \mu_1\mu_2/r^4$.

Для простоти розглянемо взаємодію тільки двох електронів в атомі, причому вважається, що магнітний момент ядра атома значно менший (приблизно у 1000 разів), тому ним можна знехтувати. Для електронів магнітні моменти $\mu_1 = \mu_2 = \mu_B$. У цьому випадку сила магнітної взаємодії $F_M \approx \mu_B^2/r^4$. Знак приблизної рівності означає, що сила F_M залежить не тільки від відстані, але й від взаємної орієнтації магнітних диполів. Відстань між електронами в атомі дорівнює розміру атома a , і тому сила магнітної взаємодії $F_M \approx \mu_B^2/a^4$, у той час, як сила кулонівської взаємодії цих же електронів оцінюється величиною $F_{\text{кул}} = e^2/a^2$.

Якщо врахувати формулу для магнетона Бора $\mu_B = e\hbar/2me$ і формулу для розміру атома $a = \hbar^2/mee^2$, то можна перекоонатися, що магнітні сили дійсно значно менші від електростатичних: $F_M/F_{кул} \approx (e^2/\hbar)^2 = (1/137)^2 \ll 1$.

Ця нерівність і є причиною того, що за наближеного опису атома магнітними взаємодіями можна знехтувати. Проте у багатьох явищах, зокрема магнетизму у твердих тілах, магнітні сили відіграють істотну роль.

Фізика твердого тіла вивчає досить складні просторові ґратки, що складаються з мікроскопічних частинок – атомів, іонів або молекул. При цьому сили, що діють між цими частинками, мають здебільшого або електростатичне (іонний зв'язок), або квантове «обмінне» (ковалентний зв'язок) походження. Під час утворення твердого тіла, коли атоми зближуються, різнойменні заряди притягуються, а однойменні – відштовхуються. Сила, що діє між атомами, є різницею сил притягання і відштовхування. Вплив, що чинить один атом на рух електронів в іншому атомі, такий, що результуюча сила – це завжди *притягання*.

Діюче на відстані притягання атомів (іонів, молекул) є причиною утворення й існування твердих тіл. Однак притягання домінує доти, доки атоми не наблизяться настільки, що будуть майже стикатися. Тоді починає переважати їх відштовхування – ці сили близькодійні. Нарешті, за деякої відстані сила відштовхування стає рівною силі притягання; тоді з двох атомів або іонів утвориться молекула, а з їх множини – тверде тіло.

Для фізики твердого тіла надто важливо пояснити природу сил відштовхування. Оскільки розміри електрона в сто тисяч разів менші від розмірів атома (і так само малий розмір ядра атома), то з погляду «класичної» механіки виявляється, що атом складається здебільшого з «порожнечі» – так мало місця займають у ньому електрони і ядро. Однак у фізиці твердого тіла (і особливо в її важливому розділі – кристалографії) використовується цілком обґрунтоване припущення про те, що атом поводить себе як якась «тверда кулька». У фізиці твердого тіла застосовують поняття атомного або іонного радіуса – ці дані для атомів та іонів різних хімічних елементів наводяться у довідкових таблицях. Тобто кристал можна подати як регулярну ґратку правильно упакованих «твердих» кульок (іонів, атомів або молекул).

Висока просторова й часова стабільність структури, утвореної «порожніми» атомами-кульками, у квантовій механіці пояснюється тим, що зі зближенням атомів зменшується можливий простір для зв'язаних у них електронів, тобто *зменшується невизначеність координат*. Відповідно до співвідношення невизначеності Гейзенберга (підрозд. 3.6) це приводить до *збільшення невизначеності імпульсу*, а тим самим і до зростання величини

імпульсу. У підсумку зростає кінетична енергія руху електронів, а з нею – і повна енергія. Таке збільшення енергії зі зближення частинок призводить до їх *відштовхування*, оскільки електрони сусідніх атомів частіше «зустрічаються». У результаті енергетично вигідним положенням для атомів виявляється їх рознесене на певну відстань положення. Таким чином, сила *відштовхування*, що забезпечує рівновагу в структурі твердого тіла, має *квантову природу*.

Повертаючись до магнітних властивостей твердих тіл, необхідно відзначити, що електронний магнітний момент – незвичний вектор, оскільки він може орієнтуватися в просторі *тільки двома способами*: або по полю, або проти поля. Відповідно і момент кількості руху електрона завжди орієнтується $g = 2s + 1$ способами; якщо спіні $s = \frac{1}{2}$, цих способів усього два.

Найважливішим наслідком теорії Дірака був висновок про існування ан-тичастинок. Для всіх частинок існують античастинки, тотожні до частинок, крім заряду (він обернений) і магнітного моменту (він теж обернений). Для електрона античастинкою є позитрон. Частинка й античастинка, зіштовхнувшись, зникають (анігілюють), породжуючи кванти світла. І навпаки, квант світла може створити дві частинки – електрон і позитрон. Для фізики твердого тіла ця обставина є значущою, оскільки в деяких експериментах використовують опромінення кристалів позитронами і досліджують виниклі при цьому фізичні ефекти.

Електрони, протони і нейтрони називають *ферміонами* (за іменем Енріко Фермі). Цей клас охоплює всі частинки з півцілим спіном. Частинки з цілим або нульовим спіном називають *бозонами*. Така різниця між частинками (цілий або півцілий спіні) зумовлює радикальну відмінність у поведженні системи великої кількості ферміонів від системи бозонів. Принципу Паулі (у системі не може бути більше двох електронів з однаковою енергією) підкоряються тільки ферміони. На бозони ця заборона не поширюється. Більш того, бозони «намагаються» колективізуватися – збиратися (сконденсуватися) в одному стані (бозе-конденсації). Ця їхня властивість є основою квантових генераторів світла (лазерів), а також причиною таких явищ, як надтекучість і надпровідність.

3.6. Принцип невизначеності Гейзенберга і принцип Паулі

Принцип невизначеності Гейзенберга і принцип Паулі – чисто квантові, ніякої аналогії у класичній механіці не мають.

Хвильові властивості мікрочастинок унеможливають опис їх поведінки одночасним заданням точних значень координат і швидкостей. Цей факт математично описується *співвідношеннями невизначеностей* Гейзенберга (Нобелівська премія, 1932 р.): $\Delta p_x \Delta x \geq h/2$; $\Delta p_y \Delta y \geq h/2$; $\Delta p_z \Delta z \geq h/2$, де Δp_x , Δp_y і Δp_z – невизначеність компонентів імпульсу частинки по осях x , y і z відповідно, а Δx , Δy і Δz – невизначеність значень координат частинки в той самий момент часу. Таким чином, хвильові властивості мікрочастинок унеможливають опис їх поведінки одночасним заданням точних значень координат і швидкостей.

Цікаво відзначити, що для комбінацій типу $\Delta p_x \Delta y$, $\Delta p_y \Delta x$, $\Delta p_z \Delta y$ і т.д. співвідношення невизначеностей не діє – невизначеності значень *не спряжених* між собою координат і компонентів імпульсу можуть *незалежно* мати будь-які значення. Ця особливість *співвідношення невизначеностей* набуває неабиякого значення для аналізу поведінки електронів у нанорозмірних структурах.

Співвідношення невизначеностей характерне також для енергетичних і часових змінних: $E \cdot \Delta t \geq h/2$, де ΔE – невизначеність енергії системи в розглянутому квантовому стані; Δt – час перебування системи в цьому стані.

Співвідношення невизначеностей належить до фундаментальних положень фізики; воно має всебічне експериментальне підтвердження.

Перехід до класичної механіки завжди можливий, якщо $h = 0$. Відповідно до принципу Гейзенберга невизначеності і координати (Δx), і імпульсу (Δp) одночасно можуть дорівнювати нулю, отже, частинка може мати визначену траєкторію. На рух макроскопічних тіл принцип невизначеності не поширюється: наприклад, якщо рухається кулька масою 1 г траєкторією, обумовленою з точністю до $\Delta x = 10^{-4}$ см, то невизначеність її швидкості гарантується $\Delta v = 10^{-23}$ см/с.

За логічного обґрунтування *співвідношення невизначеності* можна дійти висновку, що воно *має хвильове походження*. Дійсно, співвідношення такого типу застосовують у хвильовій оптиці. Плоска хвиля заповнює весь простір. Однак відомо, що електромагнітне поле можна сконцентрувати в обмеженій (і навіть у досить малій) ділянці простору. Тільки для цього доводиться користуватися великою кількістю хвиль: одні з них підсилюють одна одну, інші завдяки інтерференції гасять одна одну.