

1 priedas. ELEKTRONŲ SAVYBĖS

Mikrodalelių (elementariųjų dalelių, atomų) judėjimo dėsningumus ir savybes nagrinėja kvantinė mechanika. Mažiausio energijos kiekio – kvanto – sąvoką 1900 m. pradėjo taikyti M. Plankas (*Planck*). Kvantinę mechaniką kūrė ir svarbiausias jos idėjas paskelbė N. Boras (*Bohr*), V. Heizenbergas (*Heisenberg*), P. Dirakas (*Dirac*), E. Šrėdingeris (*Schrödinger*), V. Paulis (*Paul*) ir kiti garsūs XX a. pirmosios pusės mokslininkai. Kvantinė mechanika padeda giliau pažinti atomų struktūrą, cheminių ryšių prigimtį, periodinę cheminių elementų sistemą, elementariųjų dalelių savybes. Makroskopinių kūnų savybes lemia juos sudarančių dalelių judėjimas ir sąveika, o kvantinė mechanika padeda išsiaiškinti, kas lemia metalų ir puslaidininkų laidumą, kai kurių kietųjų kūnų superlaidumą, magnetines ir kitas savybes.

Šis priedas skirtas tiems, kurie nori prisiminti elektronų savybes, judėjimo dėsningumus ir būsenas. Pateikiamos žinios, reikalingos nagrinėjant puslaidininkų fizikos klausimus.

P1.1. Mikrodalelių korpuskulinis ir banginis dvilypumas. De Broilio lygtys

Šviesos prigimtis, kaip žinome, yra dvilypė. Vykstant difrakcijos ir interferencijos reiškiniams atsiskleidžia šviesos banginės savybės. Nagrinėjant šiuos reiškinius, laikoma, kad šviesa – tai elektromagnetinės bangos, kurių ilgis – λ , o dažnis – ν . Šiuos dydžius sieja formulė:

$$\lambda = c/\nu; \quad (\text{P1.1})$$

čia c – šviesos greitis.

Fotoelektrinio reiškinio ir Komptono (*Compton*) reiškinio bandymuose išryškėja šviesos korpuskulinės savybės. Tuos reiškinius pavyksta paprastai paaiškinti, laikant, kad šviesa – tai dalelių – fotonų srautas. Fotonų energija išreiškiama formule:

$$W = h\nu = \hbar\omega; \quad (\text{P1.2})$$

čia h – Planko konstanta, $\hbar = h/2\pi$; ω – kampinis dažnis.

Pagal A. Einšteiną (*Einstein*) pilnutinė energija

$$W = mc^2.$$

Taikydami šią formulę fotonui, galime rasti fotono impulsą:

$$p = mc = W/c = h\nu/c = h/\lambda. \quad (\text{P1.3})$$

Korpuskulinė ir banginė šviesos teorijos ne prieštarauja viena kitai, o, priešingai, papildo viena kitą.

1924 m. prancūzų fizikas L. de Broilis (*de Broglie*) padarė išvadą, kad dvilypė, korpuskulinė ir banginė, prigimtis būdinga ne tik šviesai, bet ir kiekvienai materialiai dalelei. Jis pasiūlė hipotezę, kad mikrodalelę, kurios masė m , energija W ir impulsas p , atitinka banga, kurios dažnis ir bangos ilgis, kaip ir šviesos atveju, išreiškiami formulėmis:

$$\nu = W/h, \quad (\text{P1.4})$$

$$\lambda = h/p. \quad (\text{P1.5})$$

Šios lygtys vadinamos de Broilio lygtimis.

L. de Broilio hipotezę patvirtino 1927 m. atlikti K. Devisono (*Davison*) ir L. Džemerio (*Gemer*) bandymai.

Mikrodaleles atitinkančios bangos dabar vadinamos de Broilio bangomis. Šios bangos nėra elektromagnetinės bangos. Jos yra tikimybinio pobūdžio: de Broilio bangos amplitudės modulio kvadratas yra proporcingas tankiui tikimybės aptikti mikrodalelę nagrinėjamu laiko momentu nagrinėjamame erdvės taške.

P1.2. Heizenbergio neapibrėžtumo sąryšiai

Klasikinėje mechanikoje dalelės būseną kiekvienu laiko momentu gali būti tiksliai apibūdinama trimis koordinatėmis x , y , z ir trimis judesio kiekio (impulso) dedamosiomis p_x , p_y , p_z . Kvantinėje mechanikoje dėl mikrodalelės korpuskulinio ir banginio dvilypumio jos būsenos tiksliai apibūdinti koordinatėmis ir impulso dedamosiomis negalima. Tuo galime įsitikinti taip samprotaudami. Jeigu mikro-

dalelės impulsas tiksliai žinomas, tai pagal (P1.5) formulę tą mikrodalelę atitinka λ ilgio banga, tai yra monochromatinė, harmoninė banga. Bet harmoninė banga tiek laike, tiek erdvėje egzistuoja nuo $-\infty$ iki $+\infty$. Vadinasi, jeigu vienareikšmiškai žinome mikrodalelės impulsą, tai nieko negalime pasakyti apie jos koordinatę: tikimybė rasti dalelę įvairiuose erdvės taškuose yra vienoda.

Įrodoma, kad nagrinėjamu laiko momentu įmanoma rasti tik mikrodalelės impulso ir koordinatės intervalus. Kiekybinį ryšį tarp šių intervalų galima nustatyti tokiu loginiu eksperimentu. Mikrodalelės padėtį erdvėje galima nustatyti, išmušus iš jos bent vieną fotoną. Jį išmušant, mikrodalelės impulsas sumažėja dydžiu

$$\Delta p = p_f = h/\lambda_f. \quad (\text{P1.6})$$

Dėl bangų difrakcijos mikrodalelės koordinatės nustatymo paklaida Δx esti nemažesnė už fotoną atitinkančios bangos ilgį λ_f :

$$\Delta x \geq \lambda_f. \quad (\text{P1.7})$$

Sudauginę (P1.6) ir (P1.7) išraiškas, gauname:

$$\Delta x \Delta p \geq h. \quad (\text{P1.8})$$

Šia nelygybe aprašomą koordinatės ir impulso neapibrėžtumo sąryšį 1927 m. nustatė V. Heizenbergas.

Jeigu mikrodalelė juda trimatėje erdvėje, galioja šios nelygybės:

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p_x &\geq h, \\ \Delta y \Delta p_y &\geq h, \\ \Delta z \Delta p_z &\geq h. \end{aligned} \quad (\text{P1.9})$$

Atsižvelgus į tai, kad ryšys tarp impulso p ir kinetinės energijos W_k išreiškiamas formule $p^2 = 2mW_k$, (P1.8) nelygybę galima pertvarkyti taip:

$$\Delta W \Delta t \geq h; \quad (\text{P1.10})$$

čia Δt – laikas, kurį mikrodalelės energijos yra intervalas yra tarp W ir $W + \Delta W$.

Koordinatės ir impulso bei energijos ir laiko neapibrėžtumai yra principiniai. Jų nepavyksta išvengti tobulinant matavimo aparatūrą.

Kadangi $p = mv$, pagal (P1.8) formulę:

$$\Delta x \Delta v \geq h/m. \quad (\text{P1.11})$$

Iš šios išraiškos matyti, kad, didėjant dalelės masei, jos koordinatės x ir greičio v neapibrėžtumai mažėja. Todėl, kai kūnai makroskopiniai, neapibrėžtumo sąryšiai neriboja koordinatės, greičio ir impulso sąvokų vartojimo. Klasikinių dalelių kvantinės savybės nepasireiškia, ir joms taikomi klasikiniai būsenų aprašymo būdai.

P1.3. Šrėdingerio lygtis ir jos sprendimas

Klasikinėje mechanikoje dalelių judėjimo uždavinius galima spręsti remiantis Niutono (*Newton*) lygtimis: jeigu žinoma dalelės masė, ją veikianti jėga ir pradinės sąlygos (dalelės koordinatė ir greičio pradinės reikšmės), galima nustatyti dalelės būsenos parametrus (koordinatę ir greitį) bėgant laikui.

Nagrinėjant neapibrėžtumo sąryšius, aiškėja, kad mikrodalelės koordinatės ir impulso neįmanoma vienareikšmiškai nustatyti, todėl šie dydžiai netinka apibūdinti mikrodalelės būsenai. Kita vertus, mikrodalelei būdingos bangos savybės. Todėl, norint apibūdinti mikrodalelės būseną, šią dalelę tenka nagrinėti kaip bangą – ieškoti ją atitinkančios banginės funkcijos.

Mikrodalelę atitinkančią banginę funkciją galima rasti sprendžiant lygtį, kurią 1926 m. sudarė E. Šrėdingeris. Dabar ji vadinama bendrąja Šrėdingerio lygtimi ir yra tokio pavidalo:

$$-j\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t} = \quad (P1.12)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(x, y, z, t) - W_p(x, y, z, t) \Psi(x, y, z, t);$$

čia m – mikrodalelės masė, W_p – mikrodalelės potencinė energija,

$j = \sqrt{-1}$ – menamasis vienetasis, $\Delta = \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2$ – Laplaso (*Laplace*) operatorius, $\Psi = \Psi(x, y, z)$ – ieškomoji banginė funkcija, aprašanti mikrodalelę kaip de Broilio bangą.

1926 m. M. Bornas (*Born*) atskleidė banginės funkcijos fizikinę prasmę. Jos modulio kvadratas $|\Psi|^2$ proporcingas tankiui tikimybės

rasti mikrodalelę nagrinėjamame erdvės taške laiko momentu t . Tikimybė rasti mikrodalelę tūryje V išreiškiama formule:

$$P = \int_V |\Psi|^2 dV. \quad (P1.13)$$

Tarę, kad mikrodalelė egzistuoja vienmatėje erdvėje, galime užrašyti:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1. \quad (P1.14)$$

Ši išraiška vadinama normavimo sąlyga. Ją tenkinanti banginė funkcija vadinama normuotąja bangine funkcija.

Pats Šrėdingerio lygties pavidalas vaizdžiai atspindi mikrodalelės korpukulini ir banginį dualizmą. Lygtyje yra banginė funkcija, aprašanti mikrodalelę kaip bangą. Be to, ši lygtis įeina mikrodalelės masė ir jos potencinė energija. Elektrono atveju W_p – tai elektriniame lauke esančio taškinio krūvio potencinė energija.

Dažnai mikrodalelės potencinė energija nepriklauso nuo laiko ir yra tik koordinatė funkcija. Tai atitinka tam tikrą stacionarią mikrodalelės būseną, pavyzdžiui, atomo elektrono judėjimą stacionaria orbita.

Jei mikrodalelės potencinė energija nekinta bėgant laikui, t. y. $W_p = W_p(x, y, z)$, tai Šrėdingerio lygtis sprendžiama kintamųjų atskyrimo metodu: banginė funkcija išreiškiama dviejų funkcijų, kurių viena priklauso tik nuo koordinatė, kita – tik nuo laiko, sandauga:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \varphi(t). \quad (P1.15)$$

Toliau, kad būtų paprasčiau nagrinėti, spręsimė vienmatį uždavinį: laikysime, kad dalelė juda tiesia trajektorija, sutampančia su x ašimi. Tada

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t). \quad (P1.16)$$

Įrašę (P1.16) į (P1.12), gauname:

$$-j\hbar \psi(x) \frac{d\varphi(t)}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m} \varphi(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - W_p(x) \varphi(t). \quad (P1.17)$$

Padaliję kiekvieną lygties (P1.17) narį iš sandaugos $\underline{\psi}(x)\underline{\varphi}(t)$, gauname:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\underline{\psi}(x)} \frac{d^2 \underline{\psi}(x)}{dx^2} - W_p = -j\hbar \frac{1}{\underline{\varphi}(t)} \frac{d\underline{\varphi}(t)}{dt}. \quad (\text{P1.18})$$

Kairioji lygties pusė yra tik koordinatės x funkcija, dešinioji – tik laiko t funkcija. Su bet kuriomis x ir t reikšmėmis lygybė gali galioti tik tuomet, kai abi lygties pusės lygios pastoviam dydžiui. Pažymėkime jį $-W$. Tada vietoje (P1.18) lygties galime užrašyti lygčių sistemą:

$$\frac{d^2 \underline{\psi}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [W - W_p(x)] \underline{\psi}(x) = 0. \quad (\text{P1.19})$$

$$\frac{d\underline{\varphi}(t)}{dt} = -j \frac{W}{\hbar} \underline{\varphi}(t). \quad (\text{P1.20})$$

Iš (P1.19) lygties matyti, kad dydis W turi energijos dimensiją. Įrodoma, kad jis – pilnutinė mikrodalelės energija.

Funkcija $\underline{\psi}(x)$ priklauso tik nuo koordinatės, turi banginės funkcijos amplitudės prasmę ir rodo, kaip banginės funkcijos amplitudė priklauso nuo koordinatės. (P1.19) lygtis vadinama stacionariąja Šrėdingerio lygtimi. Antrosios lygties (P1.20) sprendinys aprašo banginės funkcijos kitimą bėgant laikui:

$$\underline{\varphi}(t) = C \exp\left(-j \frac{W}{\hbar} t\right) = C e^{-j\omega t}; \quad (\text{P1.21})$$

čia C – konstanta, $\omega = 2\pi\nu = W/\hbar$ – kampinis dažnis.

Gautoji funkcijos $\underline{\varphi}(t)$ išraiška liudija, kad tais atvejais, kai mikrodalelės energija yra pastovi, banginė funkcija kinta pagal harmoninį dėsnį.

Toliau šiame priede spręsimė Šrėdingerio lygtį ir nagrinėsime įvairiomis sąlygomis egzistuojančių mikrodalelių savybes.

P1.4. Laisvosios mikrodalelės savybės

Mikrodalelė yra laisvoji, jeigu jos neveikia išorinės jėgos. Tada dalelės potencinė energija lygi nuliui, pilnutinė energija W lygi jos kinetinei energijai W_k , ir dalelė juda pastovioju greičiu.

Tarę, kad mikrodalelės greičio vektoriaus kryptis sutampa su x ašimi, raskime mikrodalelę atitinkančią banginę funkciją ir pasiaiškinkime, kaip, žinodami banginę funkciją, galime atskleisti dalelės savybes.

Kai $W_p = 0$, stacionarioji Šrėdingerio lygtis užrašoma paprasčiau:

$$\frac{d^2 \underline{\psi}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} W_k \underline{\psi}(x) = 0. \quad (\text{P1.22})$$

Dalelės kinetinę energiją galima išreikšti formule:

$$W_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}. \quad (\text{P1.23})$$

Įrašę (P1.23) į (P1.22), gauname:

$$\frac{d^2 \underline{\psi}(x)}{dx^2} + k^2 \underline{\psi}(x) = 0; \quad (\text{P1.24})$$

čia $k = 2\pi/\lambda = p/\hbar = \omega/c$ – bangos skaičius.

Antrosios eilės diferencialinės lygties (P1.24) daliniai sprendiniai išreiškiami formulėmis:

$$\underline{\psi}_1(x) = \underline{A}_1 e^{jkx}, \quad (\text{P1.25})$$

$$\underline{\psi}_2(x) = \underline{A}_2 e^{-jkx}; \quad (\text{P1.26})$$

čia \underline{A}_1 ir \underline{A}_2 – konstantos.

Bendrasis Šrėdingerio lygties (P1.19) sprendinys yra šių dalinių sprendinių suma:

$$\underline{\psi}(x) = \underline{\psi}_1(x) + \underline{\psi}_2(x) = \underline{A}_1 e^{jkx} + \underline{A}_2 e^{-jkx}. \quad (\text{P1.27})$$

Tada pagal (P1.16), (P1.21) ir (P1.27) bendrasis Šrėdingerio lygties (P1.12) sprendinys yra toks:

$$\underline{\Psi}(x, t) = \underline{\psi}(x)\underline{\phi}(t) = \underline{A} \exp[j(kx - \omega t)] + \underline{B} \exp[-j(kx + \omega t)];$$

(P1.28)

čia \underline{A} ir \underline{B} – konstantos.

Šis sprendinys reiškia dviejų plokščiųjų monochromatinių bangų superpoziciją. Pirmasis dėmuo aprašo krintančiąją bangą, sklindančią teigiama x ašies kryptimi, antrasis dėmuo – atspindėtąją bangą, sklindančią priešinga kryptimi. \underline{A} ir \underline{B} yra tų bangų kompleksinės amplitudės.

Jeigu laisvoji mikrodalelė juda x ašies kryptimi, ją atitinka krintančioji banga, atspindėtosios bangos nėra ($\underline{B} = 0$). Tada $\underline{\Psi}(x, t) = \underline{A} \exp[j(kx - \omega t)]$ ir

$$|\underline{\Psi}|^2 = \underline{\Psi} \cdot \underline{\Psi}^* = |\underline{A}|^2; \quad (\text{P1.29})$$

čia $\underline{\Psi}^*$ – jungtinė $\underline{\Psi}$ kompleksinė funkcija.

Ši išraiška liudija, kad dalelės buvimo taške tikimybės tankis nepriklauso nei nuo to taško koordinatės, nei nuo laiko. Tai reiškia, kad bet kuriuo laiko momentu laisvąją mikrodalelę vienodai tikėtina aptikti bet kurioje erdvės vietoje.

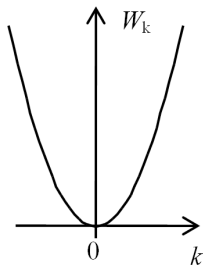
Mikrodalelės kinetinės energijos išraiškai (P1.23) galima suteikti pavidalą:

$$W_k = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2.$$

(P1.30)

Vadinasi, mikrodalelės kinetinė energija tiesiogiai proporcinga ją atitinkančios bangos skaičiaus kvadratui. Energijos W_k priklausomybės nuo k grafikas yra kvadratinės parabolės pavidalo (P1.1 pav.).

Sprendami Šrėdingerio lygtį, bangos skaičiaus k neribojome. Vadinasi, laisvo-



P1.1 pav. Laisvosios mikrodalelės kinetinės energijos priklausomybė nuo bangos skaičiaus

sios mikrodalelės energija gali būti lygi 0 arba įgyti bet kokią teigiamą reikšmę. Kitaip tariant, **laisvosios mikrodalelės energijos spektras yra ištisinis.**

Banginės funkcijos išraiškoje (P1.28) eksponentinės funkcijos argumentas ($kx - \omega t$) aprašo krintančiosios bangos fazę. Kad fazė būtų pastovi, tai yra

$$kx - \omega t = \text{const}, \quad (\text{P1.31})$$

iš šios formulės galime gauti bangos fazės sklidimo greičio – *fazinio greičio* – išraišką:

$$v_f = dx/dt = \omega/k. \quad (\text{P1.32})$$

Toliau, pasinaudoję (P1.2), (P1.30) formulėmis ir bangos skaičiaus išraiška $k = 2\pi/\lambda$, galime gauti:

$$v_f = \frac{h}{2m\lambda} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}. \quad (\text{P1.33})$$

Iš šios formulės matyti, kad mikrodalelę atitinkančios de Broilio bangos fazinis greitis kinta, kintant bangos ilgiui, – pasireiškia greičio dispersija.

Banga gali pernešti energiją. Energijos pernešimo greitį apibūdina bangos *grupinis greitis*, išreiškiamas formule:

$$v_g = d\omega/dk.$$

Remdamiesi (P1.2), (P1.30) formulėmis ir bangos skaičiaus išraiška, galime įrodyti, kad

$$v_g = v.$$

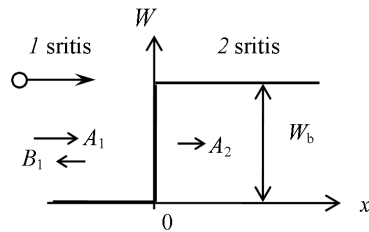
Taigi mikrodalelę atitinkančios de Broilio bangos grupinis greitis lygus tos mikrodalelės judėjimo greičiui.

P1.5. Mikrodalelė ir barjeras. Tunelinis reiškinys

Naudodamiesi Šrėdingerio lygtimi, panagrinėkime, kas atsitinka, kai judanti tam tikra kryptimi mikrodalelė sutinka potencialo barjerą. Klausimas svarbus todėl, kad mikrodalelių kelyje barjerų pasitaiko dažnai: vykstant termoelektrinei emisijai potencialo barjerą turi įveikti išlekiantys iš katodo elektronai; tekant srovei, krūvininkai sutinka

potencialo barjerus, įveikdami metalų, metalo ir puslaidininkio sandūras bei pn sandūras.

Kad uždavinys būtų paprastesnis, panagrinėkime mikrodalelę, judančią vienmatėje erdveje x ašies kryptimi. Laikykime, kad ji sutinka staigų baigtinio aukščio, begalinio storio barjerą (P1.2 pav.).



P1.2 pav. Potencialo barjeras

1 srityje ($x < 0$) dalelės potencinė energija lygi nuliui. Taške $x = 0$ ji turi įveikti stabdymo lauko sukurtą barjerą. 2 srityje dalelės potencinė energija tampa $W_p = W_b$; čia W_b – barjero aukštis. Spręsdami Šrėdingerio lygtį, rasime tikimybę, kad dalelė barjerą įveiks.

1 srityje $W_p = 0$, tad stacionarioji Šrėdingerio lygtis (P1.19) kaip ir laisvosios mikrodalelės atveju yra paprastesnio pavidalo:

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} W \psi_1(x) = 0; \quad (\text{P1.34})$$

čia $\psi_1(x)$ – dalelę 1 srityje aprašanti banginė funkcija.

(P1.34) lygtis analogiška jau aptartai (P1.22) lygčiai. Jos sprendinys išreiškiamas formule:

$$\psi_1(x) = \underline{A}_1 e^{ik_1 x} + \underline{B}_1 e^{-ik_1 x}; \quad (\text{P1.35})$$

čia

$$k_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1} = \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar} \quad (\text{P1.36})$$

yra mikrodalelę atitinkančios bangos skaičius 1 srityje.

2 srityje $W_p(x) = W_b = \text{const}$, todėl stacionariąją Šrėdingerio lygtį ir jos sprendinį galime užrašyti tokiomis formulėmis:

$$\frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - W_b) \psi_2(x) = 0, \quad (\text{P1.37})$$

$$\psi_2(x) = \underline{A}_2 e^{ik_2 x} + \underline{B}_2 e^{-ik_2 x}; \quad (\text{P1.38})$$

čia

$$\frac{k_2}{\lambda_2} = \frac{2\pi}{\lambda_2} = \frac{\sqrt{2m(W - W_b)}}{\hbar} \quad (\text{P1.39})$$

yra bangos skaičius 2 srityje.

Sprendinio (P1.35) pirmasis dėmuo atitinka krintančiąją 1 srityje bangą, kurios amplitudė \underline{A}_1 . Antrasis dėmuo atitinka atspindėtąją bangą, kurios amplitudė \underline{B}_1 . Kaip jau buvo minėta, de Broilio bangos amplitudės modulio kvadratas apibūdina dalelės buvimo nagrinėjamame taške tikimybės tankį. Todėl santykis

$$\frac{|\underline{B}_1|^2}{|\underline{A}_1|^2} = R \quad (\text{P1.40})$$

nusako dalelės atspindžio nuo barjero tikimybę ir vadinamas *atspindžio koeficientu*.

Sprendinio (P1.38) pirmasis dėmuo aprašo 2 srityje x ašies kryptimi sklindančią bangą. Reiškiny

$$\frac{\lambda_1 |\underline{A}_2|^2}{\lambda_2 |\underline{A}_1|^2} = D \quad (\text{P1.41})$$

aprašo tikimybę, kad dalelė barjerą įveiks. Dydis D vadinamas barjero *skaidrumo koeficientu*.

Dalelė barjerą įveikia arba nuo jo atsispindi. Todėl

$$R + D = 1.$$

Jeigu barjeras be galo platus, 2 srityje atspindėtosios bangos nėra. Todėl $\underline{B}_2 = 0$.

Dalelės buvimo taške $x = 0$ tikimybės tankis turi būti vienodas nesvarbu iš kurios pusės prie to taško priartėjama. Todėl turi būti tenkinamos šios laukų susiejimo taške $x = 0$ sąlygos:

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0), \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0). \end{aligned} \quad (\text{P1.42})$$

Pasinaudoję (P1.42), (P1.35) ir (P1.38), gauname:

$$\begin{cases} \underline{A}_1 + \underline{B}_1 = \underline{A}_2, \\ k_1 \underline{A}_1 - k_1 \underline{B}_1 = k_2 \underline{A}_2. \end{cases} \quad (\text{P1.43})$$

Iš čia

$$\underline{B}_1 = \underline{A}_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2},$$

$$R = \frac{|\underline{B}_1|^2}{|\underline{A}_1|^2} = \frac{|k_1 - k_2|^2}{|k_1 + k_2|^2}. \quad (\text{P1.44})$$

Jeigu mikrodalelės energija W didesnė už barjero aukštį W_b , tai laikoma, kad barjeras yra žemas. Tada bangos skaičius k_2 yra realusis, už k_1 mažesnis dydis, ir dalelės atspindžio nuo barjero koeficientas išreiškiamas formule:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2. \quad (\text{P1.45})$$

Jeigu $W_p \neq 0$, tai pagal (P1.36), (P1.39) ir (P1.44) gauname, kad $R > 0$. Vadinasi, mikrodalelė gali atspindėti netgi nuo žemo potencialo barjero. Šia prasme mikrodalelės savybės iš esmės skiriasi nuo klasikinės dalelės savybių: klasikinė dalelė žemą barjerą visada įveikia.

Barjero aukščiui didėjant, mikrodalelės atspindžio koeficientas R didėja. Kai barjero aukštis W_b pasiekia W , bangos skaičius k_2 sumažėja iki 0, o mikrodalelės atspindžio nuo barjero tikimybė padidėja iki 1.

Kai barjeras aukštas ($W_b > W$), bangos skaičius k_2 yra menamasis dydis:

$$k_2 = jk_2^* = j \sqrt{\frac{2m(W_p - W)}{\hbar}}; \quad (\text{P1.46})$$

čia k_2^* – realusis dydis.

Tada pagal (P1.44) atspindžio koeficientas lygus 1. Stacionariosios Šrėdingerio lygties sprendinys 2 srityje išreiškiamas formule:

$$\underline{\psi}_2(x) = \underline{A}_2 e^{-k_2^* x}.$$

Tuomet

$$|\underline{\psi}_2|^2 = |\underline{A}_2|^2 e^{-2k_2^* x}.$$

Iš šios išraiškos matyti, kad 2 srityje banga ne sklinda, o eksponentiškai gęsta. Tačiau tikimybės tankis rasti dalelę 2 srityje nelygus 0. Vadinasi, prieš atspindėdama nuo aukšto barjero, mikrodalelė, kaip de Broilio banga, išiskverbia į barjero sritį.

Jeigu mikrodalelė gali išiskverbtis į barjero sritį, tai ji gali įveikti aukštą ploną potencialo barjerą (P1.3 pav.). Mikrodalelei nepakanka energijos, kad ji peršoktų per barjerą. Mikrodalelė tarsi pramuša ploname barjere tunelį ir per jį prasiskverbia. Todėl reiškiny, kai mikrodalelė įveikia aukštą, bet ploną potencialo barjerą, vadinamas *tuneliniu reiškiniu*.

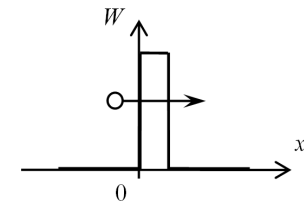
Remiantis išraiška (P1.47), galima įrodyti, kad aukšto plono stačiakampio barjero skaidrumo koeficientas – tikimybė, kad mikrodalelė prasiskverbs per barjerą, išreiškiamas formule:

$$D = D_0 \exp\left(-2a\sqrt{2m(W_b - W)}/\hbar\right);$$

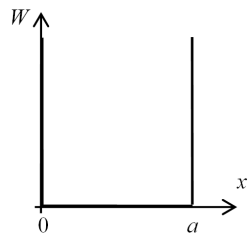
čia D_0 – artimas 1 koeficientas.

Klasikinė dalelė per aukštą barjerą neprasiskverbia.

P1.6. Mikrodalelė potencialo duobėje



P1.3 pav. Mikrodalelė ir aukštas plonas barjeras



P1.4 pav. Potencialo duobė

Panagrinėkime potencialo duobėje esančios mikrodalelės savybes. Paprasčiausias tokios duobės pavyzdys gali būti metalo dulkelė. Elektronai iš tokios dulkelės negali laisvai ištrūkti: išeinantį iš dulkelės elektroną veikia joje liekantis teigiamasis krūvis, ir elektronas turi nugalėti potencialo barjerą.

Išsiaiškinkime, kas svarbiausia, taikydami paprasčiausią modelį. Sakykime, kad mikrodalelė yra vienmatėje duobėje, duobė yra be galo gili ir jos dugnas sutampa su ašimi (P1.4 pav.).

Potencialo duobėje (kai $0 < x < a$) dalelės potencinė energija lygi nuliui. Tada stacionarioji Šrėdingerio lygtis (P1.19) ir jos sprendinys išreiškiami formulėmis:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} W_k \psi(x) = 0, \quad (P1.48)$$

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}; \quad (P1.49)$$

čia

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\sqrt{2mW}}{\hbar}. \quad (P1.50)$$

Dalelė negali įveikti be galo aukštų potencialo barjerų, kai $x = 0$ ir $x = a$. Todėl turi būti tenkinamos kraštinės sąlygos:

$$\psi(0) = 0,$$

$$\psi(a) = 0.$$

Pritaikę pirmąją iš šių sąlygų, gausime:

$$A + B = 0,$$

$$B = -A.$$

Tada

$$\psi(x) = 2jA \sin kx = C \sin kx; \quad (P1.51)$$

čia C – pastovus koeficientas.

Banginė funkcija turi tenkinti antrąją kraštinę sąlygą, todėl gauname:

$$\psi(a) = C \sin ka = 0.$$

Jeigu dalelė yra duobėje, $C \neq 0$. Tada $\sin ka = 0$. Ši sąlyga tenkinama, kai $ka = n\pi$; čia $n = 1; 2; 3; \dots$. Taigi potencialo duobėje esančią mikrodalelę atitinka de Broilio banga, kurios bangos skaičiaus k reikšmės gali būti tik tam tikros, kvantuotos:

$$k = \frac{n\pi}{a}; \quad (P1.52)$$

čia n – sveikasis skaičius, vadinamas kvantiniu skaičiumi.

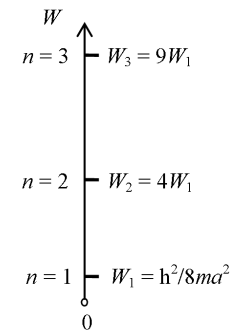
Žinodami kvantinių skaičių, taikydami (P1.50), galime apskaičiuoti energiją:

$$W = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{8ma^2} n^2. \quad (P1.53)$$

Vadinasi, potencialo duobėje mikrodalelė įgyja tam tikras kvantuotosios energijos reikšmes – **mikrodalelės energijos spektras yra diskretinis** (P1.5 pav.). Jį sudaro tik tam tikri leidžiamosios energijos lygmenys. Potencialo duobėje esančios mikrodalelės pilnutinė energija negali būti lygi 0. Tarp leidžiamųjų energijos lygmenų yra draudžiamosios energijos ruožai. Skirtumas tarp dviejų gretimų leidžiamųjų – $(n+1)$ -ojo ir n -ojo energijos lygmenų išreiškiamas formule:

$$\Delta W = W_{n+1} - W_n = \frac{\hbar^2}{8ma^2} (2n+1). \quad (P1.54)$$

Iš šios išraiškos išeina, kad tada, kai duobės plotis didesnis arba didesnė dalelės masė, nuotolis tarp leidžiamųjų energijos lygmenų yra mažesnis. Jeigu ma^2 reikšmė didesnė, spektras yra tankesnis. Kai $ma^2 \rightarrow \infty$, spektras tampa ištisinis.



P1.5 pav. Potencialo duobėje esančios mikrodalelės energijos spektras

Mikrodalelės kvantinės savybės mažiau pasireiškia ir didėjant kvantiniam skaičiui n . Tuo galima įsitikinti nagrinėjant tarpo tarp gretimų energijos lygmenų ΔW ir n -ojo lygmens energijos W_n santykį:

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

Kai $n \gg 1$, tai $\Delta W/W_n \cong 2/n$. Vadinasi, didėjant n , energijos lygmenys santykinai suartėja.

Taigi, sprendami Šrėdingerio lygtį, gavome svarbių išvadų apie potencialo duobėje esančios mikrodalelės energiją. Įrašę gautą banginio skaičiaus išraišką (P1.52) į (P1.51), pagal (P1.15) gauname tokią mikrodalelės banginę funkciją:

$$\Psi(x,t) = \underline{\psi}(x)\underline{\varphi}(x) = C \sin \frac{n\pi}{a}x \exp(-j\omega t). \quad (P1.55)$$

Tada tankis tikimybės rasti mikrodalelę įvairiuose duobės taškuose išreiškiamas formule:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\underline{\psi}(x)|^2 = |C|^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a}x. \quad (P1.56)$$

Iš šios formulės matyti, kad tikimybės tankis priklauso nuo koordinatės x ir kvantinio skaičiaus n .

P1.7. Elektronas vandeniliškajame atome

Vandeniliškajame atome apie branduolį, kurio krūvis $Zq = Z|e|$, skrieja vienas elektronas. Jį veikia Kulono (*Coulomb*) jėga. Elektrono potencinė energija

$$W_p = -\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r};$$

čia ϵ_0 – elektrinė konstanta, r – elektrono atstumas nuo branduolio.

Potencinės energijos priklausomybės nuo r pobūdis parodytas P1.6 pav. Iš jo matyti, kad be galo nutolusio nuo branduolio (laisvojo) elektrono potencinė energija lygi nuliui. Mažėjant atstumui r ,

elektrono potencinė energija mažėja. Elektronas vandeniliškajame atome yra tarsi potencialo duobėje. Ta duobė – trimatė.

Elektrono būsenos randamos sprendžiant Šrėdingerio lygtį. Kadangi laukas, kuriame juda elektronas, yra simetriškas centro atžvilgiu, lygtį tikslingiausia spręsti, naudojantis sferinėmis koordinatėmis. Lygtis sprendžiama kintamųjų atskyrimo metodu. Dabar lygties sprendimą praleisime ir aptarsime svarbiausius rezultatus.

Kadangi elektronas juda trimatėje erdvėje, tai jo būsenai aprašyti reikia trijų kvantinių skaičių.

Pirmasis iš jų vadinamas *pagrindiniu* kvantiniu skaičiumi n . Jo reikšmės: $n=1; 2; 3; \dots$

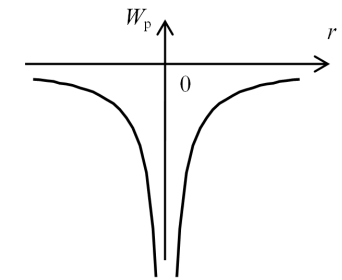
Žinant pagrindinį kvantinį skaičių, galima rasti pilnutinę elektrono energiją:

$$W_n = -\frac{Z^2 m q^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -Z^2 \frac{Rch}{n^2}; \quad (P1.57)$$

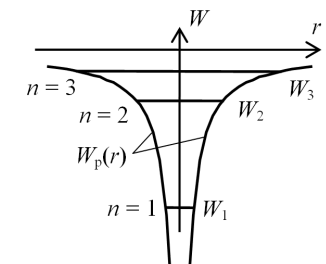
čia R – Rydbergo (*Rydberg*) konstanta.

Pagal (P1.57) elektronas atome gali užimti tam tikrus energijos lygmenis (P1.7 pav.).

Kai $n=1$, sakoma, kad elektronas ir visas atomas yra pagrindinės būsenos. Vandenilio atomo atveju (kai $Z=1$), atlikę skaičiavimus, gautume, kad $W_1 \cong -13,6 \text{ eV}$.



P1.6 pav. Vandeniliškojo atomo elektrono potencinės energijos priklausomybė nuo jo atstumo iki branduolio



P1.7 pav. Vandeniliškojo atomo elektrono energijos lygmenys

Antrasis kvantinis skaičius vadinamas *orbitiniu* kvantiniu skaičiumi. Esant tam tikram n , orbitinio kvantinio skaičiaus l reikšmės gali būti $0; 1; \dots; (n-1)$. Atomo fizikoje būsenas, atitinkančias įvairias orbitinio kvantinio skaičiaus reikšmes, priimta žymėti taip: $l=0$ – s-būseną, $l=1$ – p-būseną; $l=2$ – d-būseną; $l=3$ – f-būseną ir t. t. Nurodyti žymenys kilę iš angliškų žodžių (*sharp, principal, diffuse, fundamental*).

Orbitinis kvantinis skaičius apibūdina elektrono – dalelės, turinčios masę m ir skriejančios orbita, – mechaninio judesio kiekio momentą. Kvantinėje mechanikoje, kaip ir klasikinėje mechanikoje, judesio kiekio momentas yra vektorinis dydis, išreiškiamas formule:

$$\vec{L} = m\vec{r} \times \vec{v};$$

čia m – masė, r – orbitos spindulys, \vec{v} – greitis.

Elektrono judesio kiekio momento modulis išreiškiamas formule:

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}.$$

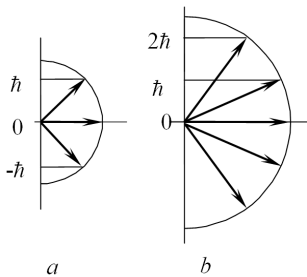
Trečiasis kvantinis skaičius – tai *magnetinis* kvantinis skaičius m_l . Jo reikšmės gali būti: $-l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (l-1), l$.

Magnetinis kvantinis skaičius nusako elektrono – dalelės, turinčios krūvį $e = -q$ ir skriejančios orbita, – magnetinį momentą ir judesio kiekio momento orientaciją išorinio magnetinio lauko atžvilgiu. Įrodoma, kad elektrono judesio kiekio momento projekcija išorinio magnetinio lauko kryptyje gali būti

$$L_H = m_l \hbar.$$

Vektorius L_H gali būti orientuotas erdveje $(2l+1)$ kryptimis (P1.8 pav.).

1921 m. O. Šterno (*Stern*) ir V. Gerlacho (*Gerlach*) atlikti bandymai parodė, kad elektrono būsenai atome nusakyti trijų kvantinių skaičių nepakanka, nes elektrono matmenys nėra be galo



P1.8 pav. Elektronų judesio kiekio momentų kryptys

maži. 1925 m. S. Gaudsmitas (*Gaudsmith*) ir H. Ulenbekas (*Ulenback*) pareiškė, kad elektronas greta judesio kiekio momento turi dar ir savąjį judesio kiekio momentą, vadinamą *sukiniu* (spinu).

Elektrono sukinytis gali būti dviejų kryptių. Jo projekcija išorinio magnetinio lauko kryptimi išreiškiama formule:

$$L_{sH} = m_s \hbar;$$

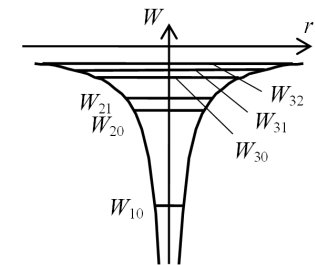
čia m_s – sukinio kvantinis skaičius. Jo galimos reikšmės: $-1/2$ ir $1/2$.

Taigi elektrono būseną vandeniliškajame atome galima nusakyti keturiais kvantiniais skaičiais: n, l, m_l ir m_s .

P1.8. Elektronai daugielektroniuose atomuose

Daugielektroniame atome kiekvieną elektroną veikia ne tik branduolio krūvis, bet ir kitų atomo elektronų krūvis. Išsprendus Šredingerio lygtį, gaunama, kad daugielektronių atomo elektrono būsenai nusakyti irgi reikia keturių kvantinių skaičių, tačiau elektrono energija priklauso ne tik nuo pagrindinio kvantinio skaičiaus n , bet ir nuo orbitinio kvantinio skaičiaus l : $W_{nl} = W(n, l)$. Tai reiškia, kad dėl elektronų sąveikos daugielektroniuose atomuose energijos lygmenys, būdingi vandeniliškiesiems atomams, suskyla ir atsiranda daugiau leidžiamosios energijos lygmenų (P1.9 pav.).

Daugielektronių atomų atveju galima tokia kvantinių skaičių interpretacija. Pagrindinis kvantinis skaičius n lemia elektrono orbitos matmenis ir elektronų sluoksnio numerį. Orbitinis kvantinis skaičius l apibūdina elektronų debesies formą. Kiekvieną l reikšmę



P1.9 pav. Daugielektronių atomo elektronų energijos lygmenys

atitinka tam tikras posluoksnius. Kadangi l gali įgyti reikšmes nuo 0 iki $(n-1)$, sluoksnyje yra n posluoksnių. Magnetinis skaičius m_l nusako orbitos erdvinę orientaciją išorinio magnetinio lauko atžvilgiu. Kiekviename posluoksnyje yra $(2l+1)$ įvairiai orientuotų orbitų. Pagaliau sukinių kvantinis skaičius m_s nusako tam tikrą orbita skriejančio elektrono sukinių orientaciją.

Nesužadintuosiuose atomuose elektronai užima žemutinius energijos lygmenis. Elektronams užimant energijos lygmenis galioja draudimo principas, kurį 1925 m. suformulavo V. Paulis. Anot jo, atome gali būti ne daugiau kaip vienas keturių kvantinių skaičių rinkinio (n, l, m_l, m_s) nulemtos būsenos elektronas. Tai reiškia, kad kiekvienoje atomo nuostoviojoje orbitoje gali būti ne daugiau kaip du elektronai su priešingų kryptų sukinių. P1.1 lentelėje pateiktos formulės, pagal kurias galima rasti didžiausią elektronų skaičių būsenose, apibūdinamose įvairiais kvantinių skaičių rinkiniais.

P1.1. lentelė. Didžiausias elektronų skaičius kvantinėse būsenose

Kvantiniai skaičiai	Elektronų skaičius
n, l, m_l, m_s	1
n, l, m_l	2
n, l	$2(2l+1)$
n	$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$

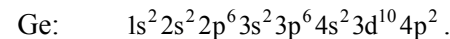
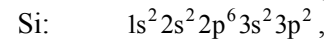
P1.2 lentelėje pateiktos žinios apie elektronų išsidėstymą nesužadintųjų germanio ir silicio atomų elektronų sluoksniuose ir pasluoksniuose.

Aiškinantis, kaip daugiaelektronų atomų elektronai užima elektronų sluoksnius ir posluoksnius, be to, kas buvo paminėta, reikia atsižvelgti dar į vieną aplinkybę. Jos esmė ta, kad aukštesnių sluoksnių

P1.2 lentelė. Elektronų skaičius sluoksniuose ir posluoksniuose

n	Sluoksnis	l	Posluoks-nis	Elektronų skaičius			$n+l$
				Max	Si	Ge	
1	K	0	$1s$	2	2	2	1
2	L	0	$2s$	2	2	2	2
		1	$2p$	6	6	6	3
3	M	0	$3s$	2	2	2	4
		1	$3p$	6	2	6	4
		2	$3d$	10		10	5
4	N	0	$4s$	2		2	4
		1	$4p$	6		2	5

apatinių posluoksnių energijos lygmenys gali būti žemiau energijos lygmenų, atitinkančių apatinių sluoksnių viršutinius posluoksnius. Įrodoma, kad, nagrinėjant energijos lygmenų išsidėstymą, reikia nagrinėti ne pagrindinio kvantinio skaičiaus n , o sumos $(n+l)$ reikšmes. Jeigu $(n+l)$ reikšmės vienodos, žemiau yra lygmuo, atitinkantis mažesnę n reikšmę. Tai įvertindami silicio ir germanio atomų elektronines struktūras galime taip užrašyti:



Remiantis elektronų būsenų daugiaelektronuose atomuose analize, galima geriau suprasti periodinę cheminių elementų sistemą. Elementų viršutinių elektronų posluoksnių sandaros periodinis pasikartojimas lemia elementų cheminių savybių pasikartojimą. Taigi elementų cheminės savybės priklauso nuo viršutinio posluoksniu elektronų – valentinių elektronų – skaičiaus.

2 priedas. PASISKIRSTYMO FUNKCIJOS

Klasikinių dalelių ir neišsigimusių sistemų elektronų pasiskirstymą aprašo Maksvelo ir Bolcmano pasiskirstymo funkcija. Išsigimusių sistemų elektronų pasiskirstymas išreiškiamas Fermio ir Dirako pasiskirstymo funkcija. Šiame priede išvesime šių funkcijų išraiškas.

P2.1. Maksvelo ir Bolcmano pasiskirstymas

Panagrinėkime dalelių, kurių energijos W_1 ir W_2 , sąveiką. Susidūrusios dalelės gali įgyti energijas W_3 ir W_4 .

Dalelių susidūrimų skaičius proporcingas jų skaičiui, kai dalelių būsenos W_1 ir W_2 :

$$N_1 = C f(W_1) f(W_2); \quad (\text{P2.1})$$

čia $f(W_1)$ ir $f(W_2)$ – pasiskirstymo funkcijos reikšmės.

Dar kartą susidūrusios dalelės gali grįžti į pradines būsenas W_1 ir W_2 . Tokių susidūrimų skaičius proporcingas $f(W_3) f(W_4)$:

$$N_2 = C f(W_3) f(W_4). \quad (\text{P2.2})$$

Termodinaminės pusiausvyros sąlygomis dalelių pasiskirstymas nesikeičia (kiek dalelių pereina iš būsenų W_1 ir W_2 į būsenas W_3 ir W_4 , tiek jų grįžta į pradines būsenas). Todėl $N_1 = N_2$ ir

$$f(W_1) f(W_2) = f(W_3) f(W_4). \quad (\text{P2.3})$$

Dalelėms pereinant iš vienu būsenų į kitas, galioja energijos tvermės dėsnis:

$$W_1 + W_2 = W_3 + W_4. \quad (\text{P2.4})$$

Pagal (P2.3) ir (P2.4)

$$f(W_1) f(W_2) = f(W_3) f(W_1 + W_2 - W_3). \quad (\text{P2.5})$$

Logaritmuodami išraišką, gauname:

$$\ln f(W_1) + \ln f(W_2) = \ln f(W_3) + \ln f(W_1 + W_2 - W_3). \quad (\text{P2.6})$$

Diferencijuodami (P2.6) pagal W_1 , gauname:

$$\frac{1}{f(W_1)} \frac{d f(W_1)}{d W_1} = \frac{1}{f(W_1 + W_2 - W_3)} \frac{d f(W_1 + W_2 - W_3)}{d W_1}. \quad (\text{P2.7})$$

Kadangi

$$d W_1 = d(W_1 + W_2 - W_3),$$

tai

$$\frac{1}{f(W_1)} \frac{d f(W_1)}{d W_1} = \frac{1}{f(W_1 + W_2 - W_3)} \frac{d f(W_1 + W_2 - W_3)}{d(W_1 + W_2 - W_3)}. \quad (\text{P2.8})$$

Diferencijuodami (P2.5) pagal W_2 , galime gauti:

$$\frac{1}{f(W_2)} \frac{d f(W_2)}{d W_2} = \frac{1}{f(W_1 + W_2 - W_3)} \frac{d f(W_1 + W_2 - W_3)}{d(W_1 + W_2 - W_3)}. \quad (\text{P2.9})$$

Pagal (P2.8) ir (P2.9)

$$\frac{1}{f(W_1)} \frac{d f(W_1)}{d W_1} = \frac{1}{f(W_2)} \frac{d f(W_2)}{d W_2}. \quad (\text{P2.10})$$

(P2.10) lygties kairioji pusė priklauso tik nuo W_1 , dešinioji – tik nuo W_2 . Lygybė gali būti tenkinama, kai

$$\frac{1}{f(W)} \frac{d f(W)}{d W} = -\beta; \quad (\text{P2.11})$$

čia β – nepriklausantis nuo energijos dydis.

(P2.11) lygties sprendinys išreiškiamas formule:

$$f(W) = A e^{-\beta W}. \quad (\text{P2.12})$$

Taikydami (P2.12) formulę laisvosioms dalelėms, suradę jų kinetinės energijos pasiskirstymo funkciją ir pasirėmę sąlygomis

$$\int_0^{\infty} f(W_k) dW_k = 1 \quad (\text{P2.13})$$

ir

$$\int_0^{\infty} W_k f(W_k) dW_k = \frac{3kT}{2}, \quad (\text{P2.14})$$

galime gauti, kad $\beta = 1/kT$.

Tada

$$f(W) = f_B(W) = A e^{-W/kT}. \quad (\text{P2.15})$$

Gautoji formulė aprašo Maksvelo ir Bolcmano pasiskirstymą.

P2.2. Fermio ir Dirako pasiskirstymas

Nagrinėdami neišsigimusių dalelių sistemą, laikėme, kad dalelių susidūrimų skaičius nepriklauso nuo būsenų, į kurias jos pereina, būklės. Dabar panagrinėkime išsigimusios sistemos dalelių sąveiką. Kai sistemoje yra daug dalelių, tai būsenos, kurių energijos W_3 ir W_4 , gali būti užimtos. Tada dalelių susidūrimas, po kurio jos įgytų energijas W_3 ir W_4 , yra negalimas.

Tikimybė, kad būsena yra laisvoji, lygi $(1 - f_F(W))$. Tada skaičiai dalelių, pereinančių iš būsenų W_1 ir W_2 į būsenas W_3 ir W_4 ir atgal, išreiškiami formulėmis:

$$N_1 = C f_F(W_1) f_F(W_2) [1 - f_F(W_3)] [1 - f_F(W_4)], \quad (\text{P2.16})$$

$$N_2 = C f_F(W_3) f_F(W_4) [1 - f_F(W_1)] [1 - f_F(W_2)]. \quad (\text{P2.17})$$

Termodinaminės pusiausvyros sąlygomis galioja lygybė $N_1 = N_2$.

Taigi

$$f_F(W_1) f_F(W_2) [1 - f_F(W_3)] [1 - f_F(W_4)] = \quad (\text{P2.18})$$

$$f_F(W_3) f_F(W_4) [1 - f_F(W_1)] [1 - f_F(W_2)].$$

Padaliję abi lygties puses iš $f_F(W_1) f_F(W_2) f_F(W_3) f_F(W_4)$, gautume:

$$\left[\frac{1}{f_F(W_1)} - 1 \right] \left[\frac{1}{f_F(W_2)} - 1 \right] = \left[\frac{1}{f_F(W_3)} - 1 \right] \left[\frac{1}{f_F(W_4)} - 1 \right]. \quad (\text{P2.19})$$

Šiai formulėi galima suteikti pavidalą, analogišką (P2.3). Taigi galima pasinaudoti (P2.11) formule, kuri dabar įgyja tokį pavidalą:

$$\left[\frac{1}{f_F(W)} - 1 \right]^{-1} \frac{d}{dW} \left[\frac{1}{f_F(W)} - 1 \right] = \gamma. \quad (\text{P2.20})$$

Integruodami (P2.20) gautume:

$$\frac{1}{f_F(W)} - 1 = B e^{\gamma W}. \quad (\text{P2.21})$$

Tada

$$f_F(W) = \frac{1}{B e^{\gamma W} + 1}. \quad (\text{P2.22})$$

Kai dalelių sistema neišsigimusi, funkcijos reikšmė turi būti daug mažesnė už 1. Be to, pasiskirstymo funkcija turi įgyti Maksvelo ir Bolcmano pasiskirstymo funkcijos pavidalą:

$$f_F(W) \cong \frac{1}{B} e^{-\gamma W} = f_B(W). \quad (\text{P2.23})$$

Taigi $\gamma = 1/kT$ ir

$$f_F(W) = \frac{1}{B e^{W/kT} + 1}. \quad (\text{P2.24})$$

Dydis B šioje formulėje yra dalelių sistemos parametras. Sakykime, kad $B = e^{-W_F/kT}$. Tada

$$f_F(W) = \frac{1}{e^{(W-W_F)/kT} + 1}; \quad (\text{P2.25})$$

čia W_F – dalelių sistemos parametras, kuris, kaip žinome, vadinamas Fermio energijos lygmeniu.

3 priedas. DECIBELAI

Elektronikoje galių santykiai dažnai apibūdinami nesisteminiais vienetais – *belais* ir *decibelais*. Vienetai taip pavadinti pagerbiant vieną iš telefono išradėjų A. G. Belą (*Alexander Graham Bell*).

Belai skaičiuojami pagal formulę:

$$A = \lg \frac{P_2}{P_1}; \quad (\text{P3.1})$$

čia P_1 ir P_2 – galios vertės, kurias norima palyginti.

Jeigu galių santykis lygus 10, tai $A = 1$ B.

Praktikoje belas yra pernelyg didelis vienetas, todėl dažniau santykiai nusakomi decibelais. Decibelas yra dešimtoji belo dalis. Decibelai skaičiuojami pagal formulę:

$$A = 10 \lg \frac{P_2}{P_1} \text{ (dB)}. \quad (\text{P3.2})$$

Taigi galių santykį, kuris lygus 10, atitinka 10 dB. Kai galių santykis lygus 100, tai $A = 20$ dB. Jeigu $P_2 > P_1$, tai $A > 0$. Jeigu $P_2 < P_1$, tai $A < 0$.

Kai žinome decibelus, galių santykį galime rasti pagal formulę:

$$\frac{P_2}{P_1} = 10^{A/10}. \quad (\text{P3.3})$$

Kartais galia lyginama su 1 W, 1mW ar 1μW:

$$A = 10 \lg \frac{P_2}{1 \text{ W}_1} \text{ [dBW]}, \quad (\text{P3.4})$$

$$A = 10 \lg \frac{P_2}{1 \text{ mW}} \text{ [dBm]}, \quad (\text{P3.5})$$

$$A = 10 \lg \frac{P_2}{1 \mu\text{W}} \text{ [dB}\mu\text{]}. \quad (\text{P3.6})$$

$$A \text{ [dBW]} = -30 + A \text{ [dBm]} = -60 + A \text{ [dB}\mu\text{]}. \quad (\text{P3.7})$$

Dažnai lengviau pavyksta išmatuoti įtampą, o ne galią. Tada bendroji decibelų išraiška (P3.2) įgyja pavidalą:

$$A = 10 \lg \frac{U_2^2/R_2}{U_1^2/R_1} = 10 \left(2 \lg \frac{U_2}{U_1} + \lg \frac{R_1}{R_2} \right) = 20 \lg \frac{U_2}{U_1} + \lg \frac{R_1}{R_2}; \quad (\text{P3.8})$$

čia R_1 ir R_2 – varžos, kuriose, veikiant įtampoms U_1 ir U_2 vartojamos galios P_1 ir P_2 .

Jeigu varžos R_1 ir R_2 vienodos, (P3.8) formulė tampa paprastesnė:

$$A = 20 \lg \frac{U_2}{U_1}. \quad (\text{P3.9})$$

Tada, jeigu žinome decibelus, įtampų santykį galime rasti pagal formulę:

$$\frac{U_2}{U_1} = 10^{A/20}. \quad (\text{P3.10})$$

Kartais įtampa lyginama su 1 V arba 1 μV. Tada santykiui išreikšti decibelais taikomos formulės:

$$A = 20 \lg \frac{U_2}{1 \text{ V}} \text{ [dBV]}, \quad (\text{P3.11})$$

$$A = 20 \lg \frac{U_2}{1 \mu\text{V}} \text{ [dB}\mu\text{V]}. \quad (\text{P3.12})$$

$$A \text{ [dBV]} = -60 + A \text{ [dBmV]} = -120 + A \text{ [dB}\mu\text{V]}. \quad (\text{P3.13})$$

Decibelų ir galių bei įtampų santykius parodo lentelėje pateikti skaičiai.

A / dB	P_2 / P_1	U_2 / U_1	A / dB	P_2 / P_1	U_2 / U_1
0	1	1	0	1	1
1	1,259	1,122	-1	0,795	0,891
3	1,995	1,413	-3	0,501	0,708
6	3,891	1,995	-6	0,2512	0,501
10	10	3,162	-10	0,100	0,316
20	100	10	-20	0,010	0,100
30	1000	31,62	-30	0,001	0,0316

4 priedas. Puslaidininkių parametrai 300 K temperatūroje

	Ge	Si	GaAs
Atomo numeris	32	14	31; 33
Atominė masė	72,6	28,1	144,6
Gardelės konstanta (nm)	0,566	0,543	0,565
Atomų tankis ($1/\text{cm}^3$)	$4,4 \cdot 10^{22}$	$5 \cdot 10^{22}$	
Tankis (g/cm^3)	5,33	2,33	5,32
Lydymosi temperatūra ($^{\circ}\text{C}$)	937	1417	1238
Draudžiamosios juostos plotis (eV)	0,67	1,1	1,4
Santykinė dielektrinė skvarba	16	11,8	13
n_i ($1/\text{cm}^3$)	$2,5 \cdot 10^{13}$	$1,5 \cdot 10^{10}$	$1,8 \cdot 10^6$
Elektronų judrumas ($\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$)	3800	1400	8500
Skylių judrumas ($\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$)	1800	500	450

5 priedas. Fizikinės konstantos

Šviesos greitis vakuume	$2,998 \cdot 10^8$ m/s
Elektrono krūvis	$-1,602 \cdot 10^{-19}$ C
Elektrono masė	$9,110 \cdot 10^{-31}$ kg
Elektrono krūvio ir masės santykis	$-1,759 \cdot 10^{11}$ C/kg
Protono masė	$1,673 \cdot 10^{-27}$ kg
Magnetinė konstanta	$1,257 \cdot 10^{-6}$ H/m
Elektrinė konstanta	$8,854 \cdot 10^{-12}$ F/m
Planko konstanta	$6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s
Avogadro skaičius	$6,022 \cdot 10^{26}$ 1/kmol
Bolemano konstanta	$1,381 \cdot 10^{-23}$ J/K
Rydbergo konstanta	$1,097 \cdot 10^7$ 1/m
Atominiis masės vienetas	$1,661 \cdot 10^{-27}$ kg
1 eV	$1,602 \cdot 10^{-19}$ J
kT , kai $T = 293$ K (20°C)	0,02525 eV
kT , kai $T = 300$ K (27°C)	0,02585 eV

6 priedas. Matavimo vienetų daugikliai ir priešdėliai

Daugiklis	Priešdėlis	Priešdėlio žymuo
10^{18}	eksa	E
10^{15}	peta	P
10^{12}	tera	T
10^9	giga	G
10^6	mega	M
10^3	kilo	k
10^2	hekto	h
10^1	deka	da
10^{-1}	deci	d
10^{-2}	centi	c
10^{-3}	mili	m
10^{-6}	mikro	μ
10^{-9}	nano	n
10^{-12}	piko	p
10^{-15}	femto	f
10^{-18}	ato	a

Literatūra

1. A. Juodviršis, M. Mikalkevičius, S. Vengris. Puslaidininkinės fizikos pagrindai. Vilnius: Mokslas, 1985. 352 p.
2. A. Kvedaravičius, R. Navickas. Silicio integrinių schemų gamybos vadovas. Vilnius: Mokslas, 1989. 320 p.
3. A. Lašas ir kt. Pramoninė elektronika. Puslaidininkiniai prietaisai ir stiprintuvai. Vilnius: Mokslas, 1988. 254 p.
4. A. Marcinkevičius. Integrinių grandynų technologiniai procesai. Vilnius: Technika, 1999. 158 p.
5. S. Masiokas. Elektrotechnika. Vilnius: Mokslas, 1989. 424 p.
6. S. Štaras, R. Kirvaitis. Mikroelektronikos pagrindai. Vilnius: Mokslo ir enciklopedijų leidykla, 1995. 292 p.
7. S. Štaras. Elektronikos pagrindai: Akustoelektronika. Vilnius: Technika, 1991. 54 p.
8. S. Štaras. Elektronikos pagrindai: Informacijos atvaizdavimo prietaisai. Elektroniniai vamzdžiai. Vilnius: Technika, 1993. 40 p.
9. S. Štaras. Elektronikos pagrindai: Santrauka. Kontroliniai klausimai. Užduotiniai. Vilnius: Technika, 1998. 80 p.
10. S. Štaras. Optinio ryšio sistemų elementai. Vilnius: Technika, 1998. 72 p.
11. A. Tamašauskas. Fizika. Vilnius: Mokslas, 1989. 193 p.
12. A. Tamašauskas, J. Vosylius. Fizika. Vilnius: Mokslas, 1990. 148 p.
13. A. Tamašauskas, J. Vosylius, Č. Radvilavičius. Fizika. Vilnius: Mokslas, 1992. 180 p.
14. A. Tamašauskas, J. Vosylius, I. Požėla. Fizika. Vilnius: Mokslo ir enciklopedijų leidykla, 1995. 176 p.
15. A. Žukauskas, M. S. Shur, R. Gaška. Introduction to solid-state lighting. New York: Wiley, 2002. 207 p.
16. J. Allison. Electronic Engineering: Semiconductors and Devices. McGraw-Hill Company, 1990. 376 p.
17. A. Bar-Lev. Semiconductors and Electron Devices. Prentice Hall International (UK) Ltd, 1993. 469 p.
18. R. Boylestad, L. Nashelsky. Electronic Devices and Circuit Theory. Prentice Hall International, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, 1992. 916 p.

-
19. G. Einarsson. Principles of Lightwave Communications. John Wiley & Sons, 1996. 355 p.
 20. S. R. Fleeman. Electronic Devices: Discrete and Integrated. Prentice Hall. Englewood Cliffs, New Jersey, 1990. 939 p.
 21. J. Gowar. Optical Communication Systems. Prentice Hall, 1993. 696 p.
 22. N. M. Horenstein. Microelectronic Circuits & Devices. Prentice Hall International, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, 1990. 902 p.
 23. Kanaan Kano. Semiconductor Devices. Prentice Hall, New Jersey, 1998. 480 p.
 24. S. O. Kasap. Principles of Electrical Engineering Materials and Devices. McGraw-Hill, 1997. 690 p.
 25. S. Y. Liao. Microwave Devices & Circuits. Prentice Hall, 1990. 542 p.
 26. D. J. H. Macleln. Optical Line Systems. Transmission Aspects. John Wiley & Sons, 1996. 618 p.
 27. J. Millman, A. Grabel. Microelectronics. McGraw-Hill Book Company, 1987. 1001 p.
 28. G. Parker. Introductory Semiconductor Device Physics. Prentice Hall International (UK) Limited, 1994. 296 p.
 29. M. Slater. Microprocessor-based Design. Prentice Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, 1989. 600 p.
 30. S. M. Sze. Semiconductor Devices. Physics and Technology. John Wiley & Sons, 1985. 524 p.
 31. J. Wilson, J. Hawkes. Optoelectronics. Prentice Hall Europe, 1998. 560 p.
 32. Электронные. квантовые приборы и микроэлектроника / Ю. Л. Бобровский и др.; Под ред. проф. Н. Д. Федорова. Москва: Радио и связь, 1998. 560 с.
 33. Ю. Пожела. Физика быстродействующих транзисторов. – Вильнюс: Моклас, 1989. 264 с.