

TALLINNA POLÜTEHNILINE INSTITUUT
Füüsika kateeder

F Ü Ü S I K A II
Metoodiline materjal

Koostanud E. Rusalep

ISBN 9789949483037 (pdf)

Tallinn
1988

Kinnitatud üldteoreetilise teaduskonna õppemetoodilise
kirjanduse kolleegiumi poolt 20.01.1986

ТАЛЛИНСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Кафедра физики

ФИЗИКА II

Методический материал

Составил Э. Рузален

На эстонском языке

Vastutav toimetaja R. Loide

Trükkimisele antud 18.03.1987. Formaat 60x84/16

Trükipg. 8,25. Tingtrükipg. 7,67. Arvestuspg. 7,54

Trükiarv 1500. Tell. nr. 184. Hind 25 kop.

Tallinna Polütehniline Instituut,

Tallinn 200108, Ehitajate tee 5,

TFI rotaprint, Tallinn 200006,

Koskla 2/9

II osa

K V A N T M E H A A N I K A J A A A T O M I - F Ü Ü S I K A

KVANTMEHAANIKA APARATUUR

De Broglie hüpotees elektronlainetest

Valgusel on nii lainelised kui korpuskulaarsed omadused. De Broglie oletas, et niisugune dualism on omane materiaale üldse, s.t. et elektronidel ja teistel osakestel on koos korpuskulaarsete omadustega ka lainelised omadused.

De Broglie lainepikkus

Elektronide ja teiste osakestega seotud lainepikkuse leidmiseks kasutas de Broglie samuti analoogiat valguskvantidega. Kvandi impulss

$$p = mc = \frac{h\nu}{c^2} c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}, \quad (470)$$

kust

$$\lambda = \frac{h}{mc} = \frac{h}{p}. \quad (471)$$

Analoogselt osakese nn. de Broglie lainepikkus

$$\lambda = \frac{h}{mu} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (472)$$

kus u on osakese kiirus ($u < c$, lõpliku seisumassiga osake ei saa liikuda kiirusega c);

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ on nn. taandatud Plancki konstant.

Analoogselt kvandi energiaga avaldub osakese energia:

$$E = h\nu = 2\pi\hbar\nu = \hbar\omega. \quad (473)$$

Elektronide difraktsioon

Elektronidel energiaga on $10 \dots 10^3$ eV on de Broglie

lainepikkus samas suurusjärgus röntgenikiirguse lainepikkusega. Kuna röntgenikiired annavad difraktsiooni kristallide ruumvõres, siis peaksid niisuguse energiaga elektronid samuti andma difraktsiooni kristallide ruumvõres. Sellise elektronide difraktsiooni avastasid Davisson ja Germer, tõestades sellega katseliselt elektronide lainelised omadused.

Mikroosakesed

Mikroosakesteks nimetatakse osakesi, millel on nii lainelised kui korpuskulaarsed omadused.

Maaramatuse relatsioon

Kuna mikroosakestel on nii korpuskulaarsed kui lainelised omadused, siis tuleb nende kirjeldamiseks kasutada nii lainet kui osakest iseloomustavaid suurusi. Kuid need on paljus teineteist välistavad.

Klassikalisele osakesele on iseloomulik see, et võime põhimõtteliselt täpselt määrata tema asukoha (koordinaadid) ja impulsi (või kiiruse) antud hetkel.

Real jultudel võime ka mikroosakest kirjeldada suuruste abil, mis rangelt võttes pole talle kui lainele iseloomulikud, näit. ligikaudu määrata tema asukoha ja impulsi. Sellise lähenduse kõlblikkuse piirid määrabki maaramatuse e. Heisenbergi relatsioon. Koordinaatide ja impulsi maaramatus on seotud järgmiselt:

$$\begin{aligned}\Delta x \Delta p_x &\geq h, \\ \Delta y \Delta p_y &\geq h, \\ \Delta z \Delta p_z &\geq h,\end{aligned}\tag{474}$$

kus Δx , Δy , Δz on koordinaatide maaramatused;

Δp_x , Δp_y , Δp_z - impulsi x, y, z-telje sihiliste komponentide maaramatused.

Jutt on põhimõttelisest maaramatusest, "veast", mitte katseveast. Kuna mikroosake kujutab endast lainet, siis ei ole

põhimõtteliselt võimalik täpselt samaaegselt määrata tema asukohta ja impulssi. Mida täpsemalt määrame ühe neist suurustest, seda määramatumaks jääb teine. Kui ühe neist suurustest määrame täiesti täpselt (näit. $\Delta x = 0$), siis jääb teine täiesti määramatuks ($\Delta p_x = \infty$).

Määramatuse relatsiooni võib seostada veel teistegi suuruste paaridega. Näit.:

$$\Delta E \Delta t \geq h, \quad (475)$$

kus Δt on ajavahemik, mille vältel on mõõdetud mikroosakese energia, ΔE on energia määramatus. Kui protsess toimub väga kiiresti, on energia määramatus väga suur. Seetõttu võib mikroosakestega toimuvatel protsessidel esineda energia jäävuse seaduse ajutisi "rikkumisi". Energia jäävus kehtib protsessi alg- ja lõppstaadiumi kohta. Saavad võimalikuks protsessid, mis klassikaliste kujutluste põhjal on võimatud.

Schrödingeri võrrand

Mikroosakeste käitumist ei saa õigesti kirjeldada klassikalise mehaanika võrrandid. Teooria, mis kirjeldab mikroosakese käitumist, peab arvestama kõiki tema omadusi. Niisuguse teooria - kvantmehaanika - rajasid Schrödinger, Heisenberg, Dirac jt.

Kvantmehaanika põhivõrrandiks on Schrödingeri võrrand. Nii nagu Newtoni võrrandeid ei saa teoreetiliselt tuletada, ei saa tuletada ka Schrödingeri võrrandit. Tema õigsust on kontrollitud katsetega. Kuna temast tulenevad järeldused on katsetega kooskõlas (võrrandit ennast otseselt katseliselt kontrollida ei saa), siis on ta loodusseadus.

Mikroosakese olekut kirjeldab kvantmehaanikas nn. lainefunktsioon Ψ . Lainefunktsioon on üldjuhul koordinaatide ja aja funktsioon. Schrödingeri võrrand on võrrand lainefunktsiooni jaoks, lainefunktsioon on Schrödingeri võrrandi lahend.

Schrödingeri võrrand on osatuletistega diferentsiaalvõrrand, tema argumentideks on mikroosakese koordinaadid ja

aeg. Schrödingeri võrrand:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (476)$$

kus m on osakese mass;

Δ - Laplace'i operaator;

U - osakese potentsiaalne energia;

$i = \sqrt{-1}$.

$$\Delta \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}. \quad (477)$$

Võrrandist järeldub, et lainefunktsiooni kuju on määratud osakese potentsiaalse energiaga, s.t. sisuliselt osakesele mõjuvate jõududega ($\vec{f} = -\text{grad } U$). Üldjuhul on potentsiaalne energia koordinaatide ja aja funktsioon.

Schrödingeri võrrand statsionaarsete olekute jaoks

Statsionaarse, s.o. ajas muutumatu jõuvälja korral ei sõltu U ajast. Sel juhul saab lainefunktsiooni esitada kahe funktsiooni korrutisena, millest üks sõltub ainult ajast, teine - ainult koordinaatidest:

$$\Psi(x, y, z, t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \psi(x, y, z), \quad (478)$$

kus E on osakese koguenergia. Selle funktsiooni ajast sõltuv osa on ühesugune kõigi statsionaarsete jõuväljade korral.

Paigutades funktsiooni (478) Schrödingeri võrrandisse (476), taandub ajast sõltuv osa välja ja saame Schrödingeri võrrandi statsionaarsete (ajast sõltumatute) olekute jaoks.

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U) \psi = 0. \quad (479)$$

Kui U ei sõltu ajast, piisab osakese oleku määramiseks selle võrrandi lahendamisest. $E - U$ on osakese kineetiline energia.

Lainefunktsioon ja tema statistiline tõlgendus

Et selgitada lainefunktsiooni füüsikalist sisu, vaatleme näitena ühes suunas levivate vabade mikroosakeste voo-
gu ehk teisiti - tasalainet.

Laine intensiivsus on võrdeline amplituudi ruuduga. Kuna lainefunktsioon on üldjuhul kompleksne suurus, siis tuleb amplituudi ruudu asemel võtta tema mooduli ruut, sest intensiivsus võib avalduda ainult reaalarvuna. Kompleksarvu mooduli ruut:

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*, \quad (480)$$

kus Ψ^* on funktsiooni Ψ kaaskompleksne.

Teisest küljest - osakeste voo intensiivsus on võrdeline voo tihedusega, s.o. osakeste arvuga ruumalaühikus. Mikroosakeste korral ei saa aga rääkida tema täpsest asuko-
nast (määramatuse relatsioon), vaid tõenäosusest osakeste leidmiseks antud kohas ruumalaühikus. Seega osakeste arvu asemel ruumalaühikus tuleb mikroosakeste korral kasutada tõenäosust osakeste leidmiseks antud kohas ruumalaühikus ehk tõenäosuse tihedust. Järelikult: lainefunktsiooni mooduli ruut määrab tõenäosuse mikroosakeste leidmiseks antud kohas ruumalaühikus:

$$\frac{d\eta}{dV} = \Psi\Psi^*, \quad (481)$$

kus $d\eta$ on tõenäosus mikroosakeste leidmiseks ruumalas dV . Avaldist (481) võib vaadata kui lainefunktsiooni sisu määratlust. Statsionaarsete olekute korral ei sõltu tõenäosuse tihedus ajast.

Kuna vaadeldav mikroosake kusagil ruumis kindlasti asub (tõenäosus selleks on 1), siis integraal üle kogu ruumi

$$\int \Psi\Psi^* dV = 1. \quad (482)$$

Matemaatikas räägitakse niisugusel juhul, et funktsioon on normeeritud. Avaldis (482) on lainefunktsiooni normeerimistingimus.

Põhjuslikkuse printsiip klassikalises füüsikas ja kvantmehaanikas

Kvantmehaanikas pole võimalik määrata mikroosakese täpset asukohta ruumis ega tema trajektoori, vaid ennustada, millise tõenäosusega võib leida osakest erinevates ruumipunktides. Seetõttu võib tunduda, et kvantmehaanika kirjeldab osakese liikumist vähem täpselt kui klassikaline mehaanika, mis määrab "täpselt" osakese asukoha ja kiiruse igal hetkel.

Kui on teada osakese algtingimused ja talle mõjuvad jõud, võime Newtoni võrrandite abil leida osakese asukoha ja kiiruse igal ajahetkel, seega ka trajektoori. Selles seisneb klassikalise mehaanika põhjuslikkuse e. determinismi printsiip.

Kvantmehaanika avab mikroosakese käitumise palju sügavamalt. Ta lihtsalt ei määra seda, mida pole olemas. Mikroosakese jaoks kaotavad kindla asukoha ja trajektoori mõisted mõtte. Liikumine piki kindlat trajektoori ei sobi kokku lainemadustega. Piltlikult ette kujutades – mikroosake nagu "määratakse" laiali teatud ruumi. Näiteks ühte elektroni aatomis kujutame ette kui elektronpilve, mille tihedus ruumis muutub pidevalt ja sujuvalt.

Kvantmehaanikas omandavad nähtused statistilise, tõenäosusliku iseloomu. Näiteks võime välja arvutada tõenäosuse elektroni üleminekuks ühelt energiatasemelt teisele aatomis. Pole üldse täpselt määratud, millisele tasemele elektron antud tasemelt läheb, küll aga on kindel tõenäosus üleminekuks ühele või teisele tasemele. Suure hulga aatomite korral realiseeruvad need üleminekud täpselt vastavalt väljaarvutatud tõenäosusele. Selles seisnebki põhjuslikkuse printsiip kvantmehaanikas: "täpne" determineeritus asendub tõenäosusega ja see kajastab just täpselt mikroosakese reaalsust olemust.

Kvantimine, Omavaartused ja omafunktsioonid

Tulenevalt lainefunktsiooni füüsikalise sisust (tõenäosuse tihedus) peab ta alati rahuldama teatud tingimusi ja

nimelt - olema oma argumentide 1) ühine, 2) lõplik, 3) pidev ja sujuv funktsioon. Ühtlasi on Schrödingeri võrrandis parameetriks osakese koguenergia E . Matemaatikas tõestatakse, et kui osake asub potentsiaali augus, siis on sellise kujuga võrranditel ühesed, lõplikud, pidevad ja sujuvad lahendid olemas ainult parameetri E kindlatel, diskreetsetel väärtustel. Suurusi, mis ei või muutuda pidevalt, vaid võivad omandada ainult diskreetseid väärtusi, nimetatakse kvandituteks. Seega tuleneb energia (samuti teiste suuruste) kvantimine lainefunktsiooni füüsikalise sisust. Neid kindlaid parameetri väärtusi nimetatakse selle parameetri omaväärtusteks ja neile vastavaid võrrandi lahendeid - omafunktsioonideks.

Osake lõpmata sügavas ühemõõtmelises potentsiaali augus

Eeldame, et osake võib liikuda ainult piki x -telge. Potentsiaali auk on ristkülikukujuline ja lõpmata sügav. Piirkonnas $x < 0$ ja $x > 1$, $U = \infty$, piirkonnas $0 \leq x \leq 1$, $U = 0$; l on potentsiaali augu laius. Kuna $U \neq f(t)$, siis piisab Schrödingeri võrrandi lahendamisest statsionaarsete olekute jaoks. Lainefunktsioon ψ sõltub ainult koordinaadist x . Schrödingeri võrrand:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (483)$$

Kuna osake potentsiaali august väljuda ei saa, on tõenäosus leida osakest väljaspool auku 0 ja seega seal ka $\psi = 0$. Et ψ peab olema pidev, peab ta ka augu servadel olema 0.

$$\begin{cases} \psi(0) = 0, \\ \psi(1) = 0. \end{cases} \quad (484)$$

Piirkonnas, kus $\psi \neq 0$, on $U = 0$. Võrrand (483) selles piirkonnas:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0. \quad (485)$$

Tähistame

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2. \quad (486)$$

Võib veenduda, et $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, s.t. k on lainearv. Võrrand (485)

omandab kuju

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0. \quad (487)$$

Niisugune võrrand on meile tuttav harmooniliste võnkumiste juurest. Kuna augu servadel peab $\psi = 0$, valime lahendiks siinusfunktsiooni.

$$\psi(x) = a \sin(kx + \alpha). \quad (488)$$

Tingimustest (484) saame määrata konstandid k ja α .

$$\psi(0) = a \sin \alpha = 0,$$

kust saame $\alpha = 0$.

$$\psi(l) = a \sin kl = 0,$$

kus saame

$$kl = \pm \pi n \quad (n=1, 2, 3, \dots). \quad (489)$$

$n = 0$ ei kõlba, sest siis $\psi(x) \equiv 0$, s.t. osake ei asu üldse kusagil. Paigutame $k = \pm \frac{n\pi}{l}$ avaldisse (486) ja avaldame osakese energia:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad (n=1, 2, 3, \dots). \quad (490)$$

Seega nõudest, et ψ peab olema pidev, järeldubki energia kvantimine. n on energia kvantarv. Ühtlasi järeldub avaldisest (490), et osakese energia potentsiaali augus ei või olla 0.

Kuna augus $U = 0$, on E_n osakese kineetiline energia.

$$E_n = \frac{p^2}{2m},$$

kust

$$p = \sqrt{2mE} = \frac{\pi \hbar}{l} n, \quad (491)$$

s.t. ka impuls on kvanditud. Ka impuls ei saa olla 0,

s.t. osake ei vôi peatuda. Impulsi minimaalne väärtus on $\frac{\pi \hbar}{l}$.

Kuna osake vôi liikuda nii x-telje positiivses kui negatiivses suunas, muutub impulsi minimaalne väärtus piirides

$+\frac{\pi \hbar}{l} \dots -\frac{\pi \hbar}{l}$, seega vahemikus laiuselga $\frac{2\pi \hbar}{l}$. Seda vahemikku vôi vaadata kui impulsi määramatust $\Delta p_x = \frac{2\pi \hbar}{l}$.

Koordinaadi määramatus $\Delta x = l$, sest kusagil augus peab osake asuma.

$$\Delta x \Delta p = 2\pi \hbar = h,$$

mis on kooskõlas määramatuse relatsiooniga. Vôi väita ka vastupidi: impulsi ja energia kvantimine tuleneb just määramatuse relatsioonist.

Konstandi a lainefunktsiooni avaldises (488) määrame normeerimistingimusest. Kuna ψ on reaalne, siis $\psi = \psi^*$ ja

$$\psi \psi^* = a^2 \sin^2 \frac{n \pi x}{l}.$$

$$\int_0^l \psi \psi^* dx = a^2 \int_0^l \sin^2 \frac{n \pi x}{l} dx = 1. \quad (492)$$

Integreerimisvahemiku otspunktides muutub integreeritav funktsioon nulliks. Seetõttu vôi integraali väärtuse leida

$\sin^2 \frac{n \pi x}{l}$ keskvaartuse ja vahemiku laiusel 1 korrutisena.

$\sin^2 \frac{n \pi x}{l}$ keskvaartus võrdub 1/2. Seega

$$a^2 \frac{1}{2} l = 1,$$

kust

$$a = \sqrt{\frac{2}{l}} \quad (493)$$

ja

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l} \quad (n=1, 2, \dots). \quad (494)$$

Erinevalt klassikalistest kujutlustest ei saa osake viibida kõikjal augus. Näiteks kui $n = 2$, siis ei või osake viibida augu keskel (seal $\psi\psi^* = 0$).

Bohri vastavuse printsiip

Hindame naaberenergiatasemete vahelist kaugust potentsiaali augus. Avaldisest (490):

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1). \quad (495)$$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}. \quad (496)$$

Kui n on suur ($n \rightarrow \infty$), siis

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n}. \quad (497)$$

Seega kvantarvu n suurtel väärtustel $\Delta E_n \ll E_n$, s.t. toimub energiatasemete suhteline lähenemine. Kvantarvu n suurtel väärtustel annab kvantimine tulemusi, mis on lähedased klassikalistele. Selles seisneb Bohri vastavuse printsiip: suurtel kvantarvu väärtustel peavad kvantmehaanika tulemused vastama klassikalistele.

Sama printsiip üldisemal kujul: iga teooria, mis on klassikalise teooria edasiarenduseks, peab teatud piirtingimustel üle minema klassikaliseks teooriaks.

Relatiivsusteooria läheb üle klassikaliseks teooriaks, kui $\beta = \frac{v}{c} \rightarrow 0$. Analoogselt läheb kvantmehaanika üle klassikaliseks teooriaks, kui $n \rightarrow \infty$, ehk teisiti - kui võime mitte arvestada \hbar lõplikkust ($\hbar \rightarrow 0$).

Tunneliefekt

Liikugu osake jällegi x -telje positiivses suunas. Tema

teele jääb ristkülikukujuline potentsiaali barjäär kõrgusega U_0 ja laiusel l . Piirkonnas $x < 0$ ja $x > l$ $U = 0$, piirkonnas $0 \leq x \leq l$ $U = U_0 = \text{const}$.

Kui osakese kineetiline energia $E > U_0$, siis klassikalise teooria põhjal liigub osake takistamatult barjääri "kohal", piirkonnas $0 \leq x \leq l$ tema kineetiline energia ja kiirus vähenevad; kui $x > l$, saavutavad nad endise väärtuse. Kui $E < U_0$, peegeldub osake barjäärilt tagasi ja liigub vastasuunas. Läbi barjääri ta tungida ei saa.

Hoopis teisiti käitub osake kvantmehaanika põhjal: 1) isegi juhul, kui $E > U_0$, on teatud tõenäosus barjäärilt peegeldumiseks; 2) kui $E < U_0$, on teatav tõenäosus selleks, et osake läbib barjääri ja satub piirkonda $x > l$.

Vaatlemegi juhtu $E < U_0$. Kuna $U_0 \neq f(t)$, piirdume Schrödingeri võrrandiga statsionaarsete olekute jaoks.

Piirkonnas $x < 0$ (I) ja $x > l$ (III):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0, \quad (498)$$

kus E on osakese kineetiline energia. Piirkonnas $0 \leq x \leq l$ (II):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi = 0, \quad (499)$$

kusjuures $E < U_0$, s.t. $E - U_0 < 0$ (siin on E koguenergia).

Nende võrrandite üldlahendid:

$$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha x} + B_1 e^{-i\alpha x}; \quad \text{I} \quad (500)$$

$$\psi_2 = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}; \quad \text{II} \quad (501)$$

$$\psi_3 = A_3 e^{i\alpha x} + B_3 e^{-i\alpha x}, \quad \text{III} \quad (502)$$

kus

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (503)$$

ja

$$\beta^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}. \quad (504)$$

Lahend $e^{i\alpha x}$ vastab x -telje positiivses suunas levivale lainele, $e^{-i\alpha x}$ - negatiivses suunas levivale lainele (peegeldunud laine). Kuna piirkonnas III on reaalselt ainult x -telje positiivses suunas leviv laine, tuleb võtta $B_3 = 0$.

Ülejäänud konstandid saab jällegi leida tingimustest, mida peab rahuldama lainefunktsioon. Selleks, et ψ oleks pidev kogu x muutumiskiirkonnas, peab

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad (505)$$

ja

$$\psi_2(1) = \psi_3(1). \quad (506)$$

Selleks, et funktsioonil ψ poleks murdekohti (ta peab olema sujuv), peavad ka tuletised olema pidevad.

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \quad (507)$$

ja

$$\psi_2'(1) = \psi_3'(1). \quad (508)$$

Nendest tingimustest saame:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ A_2 e^{\beta l} + B_2 e^{-\beta l} = A_3 e^{i\alpha l}, \\ i\alpha A_1 - i\alpha B_1 = \beta A_2 - \beta B_2, \\ \beta A_2 e^{\beta l} - \beta B_2 e^{-\beta l} = i\alpha A_3 e^{i\alpha l}. \end{cases} \quad (509)$$

Jagades kõik võrrandid läbi A_1 -ga ja kaks viimast α -ga ning tähistades

$$b_1 = \frac{B_1}{A_1}, \quad a_2 = \frac{A_2}{A_1}, \quad b_2 = \frac{B_2}{A_1}, \quad a_3 = \frac{A_3}{A_1}, \quad n = \frac{\beta}{\alpha},$$

saame:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 + b_1 = a_2 + b_2, \\ a_2 e^{\beta l} + b_2 e^{-\beta l} = a_3 e^{i\alpha l}, \\ i - ib_1 = na_2 - nb_2, \\ na_2 e^{\beta l} - nb_2 e^{-\beta l} = ia_3 e^{i\alpha l}. \end{array} \right. \quad (510)$$

Peegeldunud laine ja pealelangeva laine amplituudi moodulite ruutude suhe

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = |b_1|^2 \quad (511)$$

määrab tõenäosuse, et osake peegeldub potentsiaalibarjää-
rilt. Nimetame seda peegeldumisteguriks.

Läbiläinud laine ja pealelangeva laine amplituudi moodulite ruutude suhe

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |a_3|^2 \quad (512)$$

määrab tõenäosuse, et osake läbiks potentsiaalibarjääri.
Nimetame seda läbilaskvusteguriks.

Meid huvitab ainult läbimine, s.t. D (tegelikult $R + D = 1$).

D (a_3) leidmiseks tuleb lahendada algebraline võrran-
disüsteem (510).

Pärast mõningaid lihtsustusi ja ligikaudsusi saame:

$$D \approx e^{-2\beta l} = e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}l}, \quad (513)$$

kust on näha, et barjääri läbimise tõenäosus on seda suurem,
mida väiksem on $U_0 - E$ (ehk mida suurem on osakese energia
E), mida väiksem on osakese mass ja mida kitsam on potent-
siaalibarjäär.

Meelävaldse kujuga potentsiaali barjääri korral:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U-E)} dx}, \quad (514)$$

kus a ja b on argumendi x väärtused kohal, kus x -teljega paralleelne sirge $E = \text{const}$ lõikab kõverat $U(x)$.

Potentsiaali barjääri läbimist juhul, kui $E < U$, nimetatakse tunneliefektiks, sest piltlikult võime ette kujutada nagu liiguks osake mööda potentsiaalset energiat kujutavat kõverat kui mäge läbivat tunnelit. Klassikalise teooria seisukohalt on tunneliefekt absurdne nähtus, sest tunnelis peaks osakese kineetiline energia olema $< C$ (tunnelis on koguenergia $E < U$). Tunneliefekt on spetsiifiline kvantnähtus, millel pole analoogi klassikalises teoorias.

Sisuliselt on asi selles, et kvantmehaanikas ei oma koguenergia lahutamise kineetiliseks ja potentsiaalseks mõtet, kuna see on vastuolus määramatuse relatsiooniga. Teiselt poolt, kui osakesel on kindel kineetiline energia, siis on tal ka kindel impulss. Teiselt poolt – kui osakesel on kindel potentsiaalne energia, siis peab ta asuma kindlas kohas ruumis. Kuna aga osakese koordinaadil ja impulsil ei saa samaaegselt olla kindlaid väärtusi, siis ei saa ka T ja U olla samaaegselt täpselt määratud. Seega kindel väärtus on ainult osakese koguenergial, kuid teda ei saa esitada täpselt määratud energiatega T ja U summana.

Lineaarne harmooniline ostsillaator

Klassikalises mehaanikas on harmooniline ostsillaator harmooniliselt võnkuv osake. Vaatame ühemõõtmelist ostsillaatorit – osake võngub x -telje sihis. Tema potentsiaalne energia on sama kui klassikalises mehaanikas:

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2, \quad (515)$$

kus k on vedrupendli korral jäikus, üldiselt – elastsustegur.

$$k = m \omega_0^2, \quad (516)$$

kus ω_0 on omavõnkeringsagedus.

Schrödingeri võrrand statsionaarsete olekute jaoks:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)\psi = 0. \quad (517)$$

Klassikalise mehaanika põhjal võib x muutuda piirkonnas $-a \dots + a$ (a on amplituud). Kvantmehaanika põhjal $\psi \neq 0$ ka väljaspool neid piire. Kuid ta peab rahuldama tingimust: kui $|x| \rightarrow \infty$, siis $\psi(x) \rightarrow 0$ (nn. ääretingimus), sest potentsiaalne energia ei või lõpmatult kasvada. x kasvades peab ψ küllalt kiiresti vähenema. Võrrandi lahendamine on antud juhul liialt keeruline matemaatiline probleem. Oluline on, et ääretingimusest ja lainefunktsiooni lõplikkuse, ühesuse ja pidevuse nõudest järeldub jällegi energia kvantimine. Niisugused lahendid on olemas, kui

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (518)$$

kus $n = 0, 1, 2 \dots$.

Jällegi ei või osakese energia olla 0, ostsillaator ei või peatuda. Ostsillaatori minimaalne energia

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega_0. \quad (519)$$

Seda nimetatakse ostsillaatori põhitasemeks ehk nullenergiaks, võnkumisi minimaalse energiaga - nullvõnkumisteks. See, et ostsillaatori energia ei või olla 0, on jällegi seotud määramatuse relatsiooniga. Kaugus naabertasemete vahel

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_0. \quad (520)$$

ΔE ei sõltu kvantarvust n .

Kvantmehaaniline ostsillaator etendab tähtsat osa neis füüsikalistes nähtustes, kus on tegemist mikroosakeste võnkumisega, näiteks molekulide võnkespektrid, valguse hajutamine kristallides ülimadalatel temperatuuridel. Isegi kui absoluutne temperatuur $T \rightarrow 0$, ei lakka aatomite võnkumine kristallivõres.

Kvantarvu n jaoks kehtib nn. valikureegel:

$$\Delta n = \pm 1, \quad (521)$$

s.t. ostsillaatori energia võib muutuda ainult annuste $\hbar\omega_0$ kaupa.

Kui ostsillaator on laetud osake (näit. dipool), siis vastasmõjus elektromagnetilise väljaga võib ta üle minna ainult naabertasemele. Üleminekul ülemisele tasemele ta neelab, üleminekul alumisele kiirgab footoni $\hbar\omega_0$. Seejuures footoni sagedus võrdub ostsillaatori omavõnkesagedusega. Seega väljastab kvantmehaaniline ostsillaator sama sagedusega kiirgust kui klassikaline ostsillaator. Erinevus on kiirguse mehhanismis - klassikaline ostsillaator kiirgab pidevalt, kvantmehaaniline ostsillaator statsionaarses olekus võngub, kuid ei kiirga, kiirgab ainult ühelt tasemelt teisele üle minnes. Põhiolekus ostsillaator kiirata ei või. Klassikaline ostsillaator võib koguda energiat pidevalt, kvantmehaaniline - ainult kindlate annuste kaupa.

AATOMITE JA MOLEKULIDE FÜÜSIKA

Rutherfordi katsed

Klassikalise elektronteooria põhjal on aatomis kvaasi-elastselt seotud elektronid. Elektron jäi pikaks ajaks ain-saks aatomini teadaolevaks koostisosaks. Kuna aatom tervikuna on neutraalne, siis peab seal peale negatiivse laenguga elektronide olema ka positiivne laeng.

Küsimusele positiivsest laengust aatomis andsid vastuse Rutherfordi katsed: α -osakeste hajutamine aatomite poolt.

α -osake on kahekordselt ioniseeritud He-aatom ehk He-aatomi tuum, α -osakesi väljastavad loodulike radioaktiivsete ainete tuumad. Kitsas α -osakeste kimp suunati õhukesele (mõni sajandik mm) metall-lehele. Katsete tulemusena α -osakeste kimp hajus, kusjuures enamik osakesi läbis metall-lehe peaaegu suunda muutmata, hajunud osakeste arv vähenes hajumisnurga suurenedes, üksikud muutsid suunda $\sim 180^\circ$ võrra (põrkusid tagasi).

Nende faktide analüüsist tulenes 3 tähtsat järeldust:

1) peaaegu kogu aatomi mass on seotud aatomi positiivse laenguga;

2) positiivse laengu mõõtmed on palju väiksemad aatomi mõõtmetest (10^{-13} , 10^{-8} cm);

3) aatomi positiivne laeng $q = Ze$ (Z on elemendi järjenumber Mendelejevi tabelis).

Aatomi tuuma- ehk planetaarne mudel

Kuna positiivse laenguga on seotud peaaegu kogu aatomi mass, samal ajal aga tema mõõtmed on palju väiksemad aatomi mõõtmetest, hakati positiivset laengut aatomis nimetama aatomi tuumaks (analoogselt raku tuumaga).

Aatom on väga stabiilne süsteem. Elektronid on aatomis tasakaaluolekus. Selline tasakaal saab olla ainult dünaamiline, s.t. elektronid tiirlevad ümber tuuma, kusjuures kesktõmbejõuks on kulooniline tõmbejõud elektroni ja positiivselt laetud tuuma vahel. Niisugune süsteem on täiesti analoogne planeetide süsteemiga. Orbiidid on ellipsid (erijuhul ringid), neid võib olla lõpmata palju.

Selline mudel sattus otsekohe vastuollu klassikalise elektrodünaamikaga, sest igasugune kõverjooneline liikumine on kiirendusega liikumine, kiirendusega liikuv laeng peab aga klassikalise elektrodünaamika põhjal kiirgama elektromagnetlaineid ja seega kaotama energiat. Elektron peaks pidevalt lähenema tuumale ja $\sim 10^{-8}$ s jooksul langema tuuma - aatom peaks hävima.

Bohri postulaadid

Tekkinud vastuoludest ülesaamiseks esitas Bohr 3 postulaati (väidet, mida ei tõestata).

1. Postulaat statsionaarsetest olekutest. Aatomid võivad kestvalt viibida vaid kindlates, nn. statsionaarsetes olekutes. Vaatamata sellele, et elektronid seejuures liiguvad kiirendusega, ei kiirga aatomid energiat. Nendes olekutes on aatomi energia diskreetne: $E_1, E_2, E_3 \dots$. Igasugune energia muutus (neelamine või kiirgamine) võib toimuda vaid aatomi üleminekul ühest statsionaarsest olekust teise.

2. Sageduste tingimus.

Üleminekul ühest statsionaarset olekust teise väljas-

tavad või neelavad aatomid kindla sagedusega kiirgust:

$$\omega = \frac{E_n - E_i}{\hbar}. \quad (522)$$

3. Statsionaarses olekus võib elektron, tiireldes ringorbiidil (Bohr piirdus esialgu ringorbiitidega), omada vaid kindlaid, kvanditud impulsimomendi väärtusi.

$$L = mvr = n\hbar \quad (n=1, 2, 3, \dots), \quad (523)$$

kus u on elektroni kiirus;

r - orbiidi raadius.

Need postulaadid olid täielikus vastuolus klassikalise mehaanika ja klassikalise elektrodünaamikaga, kuid nad olid täielikus kooskõlas katseliselt kindlaks tehtud aatomi omadustega.

Vesiniku aatom Bohri järgi

Bohri teooria lähtepunktiks on:

1) elektroni tiirlemisel ümber tuuma on kesktõmbejõuks kulooniline tõmbejõud;

2) Bohri kolmas postulaat.

$$\begin{cases} \mu u^2 = \frac{e^2}{r^2}, \\ mvr = n\hbar. \end{cases} \quad (523)$$

Neist kahest võrrandist võib leida elektroni orbiidi raadiuse ja kiiruse.

$$r = \frac{\hbar^2}{4me} n^2. \quad (524)$$

Vähima orbiidi ($n=1$) raadius $r_0 = 0,529 \cdot 10^{-8}$ cm.

$$r = r_0 n^2. \quad (525)$$

Kiirus

$$u = \frac{e^2}{n\hbar}. \quad (526)$$

*Aatomifüüsikas kasutame Gaussi (CGS) süsteemi valemuid.

Elektroni kineetiline energia

$$E_k = \frac{mu^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (527)$$

Potentsiaalne energia

$$E_p = -\frac{e^2}{r} = -\frac{me^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (528)$$

Koguenergia

$$E = E_k + E_p = -E_k = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (529)$$

Nn. vesinikusarnaste ioonide korral

$$E = -\frac{1}{2} \frac{me^4 Z^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (530)$$

Vesinikusarnane ioon on selline ioon, milles on ainult üks elektron (tuuma laeng on Ze).

Valemis (528) on potentsiaalse energia nullnivooks vabitud vaba, s.o. aatomist eraldunud elektroni potentsiaalne energia ($E_p \rightarrow 0$, kui $r \rightarrow \infty$). Kuna elektroni energia aatomis tuli negatiivne, siis see tähendab, et aatomi moodustumisel energia vabaneb ja vastupidi – aatomi lõhkumiseks on vaja energiat. Seega on aatom stabiilne süsteem.

Aatomi põhi- ehk normaalolekuks on minimaalse energiaga olek ($n=1$). Kui paigutada statsionaarsete olekute energiad ühemõõtmelisele energiadiagrammile, saame energiatasemete (nivoode) skeemi, millel madalamate tasemete vaheline kaugus on märksa suurem kui kõrgemate tasemete vaheline kaugus. Kui $n \rightarrow \infty$, siis tasemed paiknevad üksteisele lõpmata lähedal, s.t. et vaba elektroni energia võib muutuda pidevalt.

Aatom normaalolekus ei kiirga. Selleks et aatom võiks kiirata, tuleb teda ergastada, s.t. energiat juurde andes viia ta kõrgemale tasemele. Üleminekul kõigilt kõrgematelt tasemetelt ühele kindlale tasemele tekib üks spektraalne seria (spektraaljoonte grupp spektrogrammil). Bohri sageduste tingimuse kohaselt

$$\omega = \frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{\hbar} = \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^3} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (531)$$

kus $R = \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^3}$ on nn. Rydbergi konstant, mille võib katseliselt määrata atomaarse vesiniku kiirgusspektrist. Kooskõla katsetega on väga hea.

Ühe spektraalse seeria korral $n_1 = \text{const}$, $n_2 = n_1 + 1$, $n_1 + 2, \dots$

Neeldumisspekter tekib üleminekutel madalamatelt tasemetelt kõrgematele.

Üleminek minimaalse energiaga tasemelt (normaalolek, $n=1$) tasemele $n = \infty$ tähendab aatomi ioniseerimist ja nende tasemete vahed kaugus võrdub ionisatsioonitööga.

Bohri teooria seletas täielikult ära vesiniku aatomi kiirgus- ja neeldumisspektri ja võimaldas arvutada ionisatsioonitöö. Kooskõla katsetega oli väga hea.

Raskused Bohri teoorias

Bohri teooriat arendas edasi Sommerfeld. Ta jõudis järeldusele, et kvantarve statsionaarse oleku määramiseks peab olema sama palju kui vabadusastmeid (ringorbiidil - 1, elliptilisel - 2). Elliptiliste orbiitide arvestamine halvendas kooskõla katsetega.

Hoopiski ei õnnestunud luua He-aatomi (2 elektroni) teooriat, rääkimata raskematest aatomitest. Samuti ei õnnestunud määrata spektraaljoonte intensiivsust (üleminekute tõenäosust tasemete vanel).

Peamine raskus Bohri teoorias on tema sisemine vastuolulisus: postulaadid olid täielikus vastuolus klassikalise teooriaga, samal ajal orbiitide arvutamisel eeldati, et nad on sellised, nagu on lubatud klassikalises teoorias ($\frac{mu^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}$).

Bohri teooria on oluline vaheetapp üleminekul klassikaliselt teoorialt kaasaegsele õpetusele aatomist - kvantmehaanikale.

Vesiniku aatom Schrödingeri teoorias

Aatomi tuuma mass on palju suurem elektroni massist. Seetõttu tuuma liikumine ühtib praktiliselt kogu aatomi kulgliikumisega ning aatomisisene liikumine on ainult elektroni liikumine ümber tuuma. Seetõttu on sellel liikumisel loomulik siduda koordinaatide alguspunkt tuumaga. Selles süsteemis on tuum liikumatuks jõuvälja allikaks.

Kuna aatomil on lõplikud mõõtmised, peab elektroni lainefunktsioon kauguse kasvades küllalt kiiresti vähenema:

$$\text{kui } r \rightarrow \infty, \quad \text{siis } \psi(r) \rightarrow 0, \quad (532)$$

kus r on elektroni kaugus tuumast.

Vesiniku aatomis ja vesinikusarnases ioonis liigub elektron tuuma kuloonilises väljas. Tema potentsiaalne energia

$$U = - \frac{Ze^2}{r}, \quad (533)$$

kus Ze on tuuma laeng (vesinikul $Z = 1$). Kuna $U \neq f(t)$, piisab jälle Schrödingeri võrrandi lahendamisest statsionaarsete olekute jaoks:

$$\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0, \quad (534)$$

kus m_e on elektroni mass.

Kuna U on tsentraalsümmeetriline, on otstarbekohane lahendada võrrand sfäärilistes koordinaatides. Võrrand lahendatakse muutujate eraldamise teel. Lainefunktsiooni saab esitada kujul:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (535)$$

Kuna võrrandi lahendamine on väga keeruline matemaatiline probleem, piirdume põhiliste tulemuste ja järeldustega. Nõudest, et ψ peab olema lõplik, ühene ja pidev ning tingimusest (532) tuleneb otseselt energia ja teiste suuruste kvantimine. Kvantarve (ja kvanditud suurusi) on sama palju kui vabadusastmeid (3). Energia

$$E = - \frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (n=1,2,3, \dots), \quad (536)$$

kvantarvu n nimetatakse peakvantarvuks. Tulemus on täpselt sama, kui Bohri teoorias (530). Kuid Bohri teoorias tuli kvantimine sisse $n, \tilde{0}$. väljastpoolt (3. postulaat). Kvantmehaanikas tuleneb kvantimine neist loomulikest nõuetest, mida peab rahuldama lainefunktsioon.

Järgmine kvanditav suurus on elektroni impulsimoment. Elektron, liikudes ümber aatomi tuuma, omab impulsimomenti, mida edaspidi nimetame orbitaalseks momendiks.

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad (537)$$

kus l antud n korral võib omandada väärtusi (sisuliselt: orbitaalmoment võib omandada kindlaid väärtusi antud energia korral):

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1, \quad (538)$$

seega kokku n erinevat väärtust. l on orbitaalkvantarv.

Vesiniku aatomi põhiolekus $n=1$ ja $l=0$ ning $L=0$, s.t. orbitaalne moment puudub.

Koos impulsimomendiga on ümber aatomi tuuma tiirleval elektronil ka magnetmoment.

$$p_m = \frac{1}{c} IS. \quad (539)$$

Seos orbitaalse momendi \vec{L} ja orbitaalse magnetmomendi \vec{p}_m vahel on lihtsalt tuletatav klassikaliste kujutluste põhjal:

$$\vec{p}_m = - \frac{e}{2m_e c} \vec{L}. \quad (540)$$

Sama seos jääb kehtima ka kvantmehaanikas (kus elektroni orbiidist enam rääkida ei saa). Seega koos orbitaalse momendiga on kvanditud ka orbitaalne magnetmoment:

$$p_m = \frac{e}{2m_e c} L = \frac{e\hbar}{2m_e c} \sqrt{l(l+1)}. \quad (541)$$

Suurust

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad (542)$$

nimetatakse Bohri magnetoniks.

$$P_m = \mu_B \sqrt{l(l+1)}. \quad (543)$$

Katseliselt saab määrata just aatomite magnetmomente.

Järgmise suurusena on kvanditud orbitaalse momendi projektsioon nn. etteantud (eelistatud) suunale. Selleks suunaks võib olla välise magnetvälja suund (vesiniku aatomi korral) või teiste elektronide (peale vaadeldava) ja tuuma magnetvälja suund. See, et orbitaalmomendi projektsioon on kvanditud, tähendab, et orbitaalmoment võib ruumis olla orienteeritud vaid kindlal viisil (nn. ruumiline kvantimine). Tähistame seda suunda z-ga. Orbitaalmomendi projektsioon suunale z:

$$L_z = m\hbar, \quad (544)$$

kus m antud l korral (sisuliselt: projektsioon vektori antud pikkuse korral) võib omandada väärtusi:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \quad (545)$$

seega $2l + 1$ erinevat väärtust. Kvantarvu m nimetatakse magnetkvantarvuks, kuna koos orbitaalmomendi (impulsimomendi) projektsiooniga on kvanditud ka magnetmomendi projektsioon.

$$P_{mz} = -\mu_B m. \quad (546)$$

Iga kvantarvude n, l, m kolmik määrab elektroni kindla oleku aatomis. Näeme, et vesiniku aatom võib ühe ja sama energia väärtuse korral olla mitmes erinevas olekus. Ühesuguse energiaga erinevaid olekuid nimetatakse kõdunenud olekuteks. Arvu, mis näitab, mitu erinevat olekut antud energia korral võib olla, nimetatakse kõdunemise kordsuseks. Leiame kõdunemise kordsuse antud n korral. Antud n-le vastab n erinevat l-i väärtust, igale l-ile vastab $2l+1$ erinevat m-i väärtust. Seega olekute arv antud n korral (kõdunemise kordsus):

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (547)$$

Näiteks kui $n=1$ (põhiolek), on olekute arv 1 (olek pole kōdunenud), kui $n=2$, on erinevate olekute arv 4 jne.

Orbitaalkvantarvu l arvvaartuste mārkimiseks kasutatakse veel järgmisi tähiseid:

1	0	1	2	3	4	5	...
	s	p	d	f	g	h	...

Erineva orbitaalmomendiga olekud võivad olla järgmised (jättes arvestamata kvantarvu m):

1s,
 2s, 2p,
 3s, 3p, 3d
 4s, 4p, 4d, 4f

jne. Number orbitaalkvantarvu tähise ees näitab peakvantarvu vāartust.

Vaatleme lühidalt veel lainefunktsioone ψ ja tõenäosuse tihedust $\psi\psi^*$. Olekus $l=0$ (s-olek) sõltub lainefunktsioon ja seega ka tõenäosuse tihedus ainult kaugusest tuumast r (ei sõltu nurkadest θ ja φ). Seega on see olek tsentraalsümmeetriline. Seejuures omab tõenäosuse tihedus maksimaalset vāartust selliste r vāartuste juures, mis võrduvad vastavate Bohri orbiitide raadiustega (525). Teiste olekute korral ($l \neq 0$) sõltuvad ψ ja $\psi\psi^*$ ka nurkadest θ ja φ .

Sterni ja Gerlachi katse

Niisiis elektronide orbitaalsed momendid (ja koos nendega magnetmomendid) ning nende momentide projektsioonid magnetvälja suunale on kvanditud ja seega võivad omada vaid kindlaid vāartusi.

On teada, et mittehomoogeenses magnetväljas mõjub magnetmomendile jõud välja sihis (analoogselt mittehomoogeenses elektriväljas dipoolile mõjuva jõuga).

See jõud

$$f = p_m \frac{\partial B}{\partial z} \cos \varphi, \quad (548)$$

kus z-telg on välja sihiline;

φ -nurk magnetmomendi vektori ja välja suuna vahel,

$$\varphi = \widehat{\vec{p}_m, \vec{B}}.$$

Valemitest (543) ja (546):

$$\cos \varphi = \frac{p_{mz}}{p_m} = - \frac{m}{\sqrt{1(1+1)}}. \quad (548a)$$

Seega võib ka $\cos \varphi$ omandada diskreetseid väärtusi, jõud f aga on võrdeline $\cos \varphi$ -ga. Suure hulga aatomite hulgas peaksid realiseeruma kõikvõimalikud orientatsioonid ja mittehomogeensest magnetväljast läbiminekul peaks aatomite kimp jagunema nii mitmeks osaks, kui mitu väärtust omab $\cos \varphi$. Näiteks kui $l=0$, siis $p_m=0$ (vesiniku aatom põhiolekus) ja mingit jõudu aatomitele ei peaks mõjuma ning aatomite kimp ei peaks jagunema. Kui $l=1$ (näiteks vesiniku aatom esimeses ergastatud olekus), siis $\cos \varphi = -\frac{1}{\sqrt{2}}; 0; +\frac{1}{\sqrt{2}}$ ja aatomite

kimp peaks jagunema kolmeks. Kõigil esimese rühma (Mendelejevi tabel) elementidel on üks nn. väliskatte e. valentselektron. Kõik nn. sisekatted (elektronkatetest tuleb lähemalt juttu hiljem) on aga täidetud ja nende magnetmomentide summa on 0. Tuuma magnetmoment on palju väiksem elektronide magnetmomentidest. Seega kogu aatomi magnetmoment võrdub valentselektroni magnetmomentiga, see aga põhiolekus on 0.

Katseid tehti esimese rühma elementidega (H, Li, Ag jt.), teise rühma elementidega (Mg, Hg-kaks valentselektroni), samuti teiste elementidega.

Katsete tulemused: H, Li, Ag aatomite kimp jagunes kaheks (ei oleks pidanud jagunema); Mg, Hg aatomite kimp ei jagunenud (oleks pidanud jagunema).

Elektroni spinn

Sterni ja Gerlachi katsete tulemuste analüüs, samuti teiste katsete tulemused (mida me ei vaatle), ning raskemate aatomite kiirgusspektrite uurimine viisid järeldusele, et

elektronidel on olemas oma sisemine impulsimoment, mida hakati nimetama spinniks, ja sellega seotud omamagnetmoment. Need momendid ei sõltu sellest, kas elektron liigub või mitte. Spinni mõiste tõid sisse Goudsmit ja Uhlenbeck. Elektron­ni spinn

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad (549)$$

kus s on spinni kvantarv, $s = \frac{1}{2}$. Seega

$$L_s = \hbar \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{3}. \quad (550)$$

Omamagnetmoment

$$\mu_s = \frac{e}{m_e c} L_s = \frac{e\hbar}{m_e c} \sqrt{s(s+1)} = \frac{e\hbar}{2m_e c} \sqrt{3} = \mu_B \sqrt{3}.$$

Nagu orbitaalne moment nii ka spinnmoment (ja omamagnetmoment) võib välises magnetväljas olla orienteeritud kindlal viisil. Täiesti analoogselt orbitaalse momendi projektsiooniga, spinni projektsioon

$$L_{sz} = m_s \hbar, \quad (551)$$

kus $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ ($m_s = -s \dots +s$; muutus on täisarvuline).

m_s on spinni magnetkvantarv, sageli nimetatakse teda ka lihtsalt spinni kvantarvuks. Tal võib olla $2s+1 = 2$ erinevat väärtust. Seega

$$L_{sz} = \pm \frac{1}{2} \hbar. \quad (552)$$

Omamagnetmomendi projektsioon

$$\mu_{sz} = -\frac{e}{m_e c} L_{sz} = -\frac{e\hbar}{m_e c} m_s = \mp \frac{1}{2} \frac{e\hbar}{m_e c} = \mp \mu_B. \quad (553)$$

Katsetes ilmnevad tavaliselt mitte spinnid (ja omamagnetmomendid), vaid nende projektsioonid. Seetõttu on tavaks rääkida, et elektroni spinn on $\frac{1}{2}$ (ühikutes \hbar), kuigi suuruselt $L_s = \frac{\hbar}{2} \sqrt{3}$, samuti räägitakse, et elektroni omamagnetmoment võrdub Bohri magnetoniga (kuigi tegelikult võrdub sellega tema projektsioon).

Algul püüti spinni seletada kui impulsimomenti, mis tekib elektroni kui kera pöörlemisel ümber oma telje. Analoogselt püüti omamagnetmomenti seletada laengu pöörlemisena. Sel juhul oleks orbitaalsete ja omamomentide päritolu ühesugune. Impulsimoment tekib massi pöörlemisel ja magnetmoment laengu pöörlemisel. Nende momentide suhe, nn. gürromagnetiline suhe, peaks olema ühesugune. Tegelikult orbitaalmomentide jaoks:

$$\frac{p_m}{L} = \frac{e}{2m_e c}, \quad (554)$$

omamomentide jaoks:

$$\frac{\mu_s}{L_s} = \frac{e}{m_e c}. \quad (555)$$

Sellest, et need suhted tulid erinevad, järeldub, et nii omamomentide teket seletada ei saa. Spinni põhjendamine elektroni kui kera pöörlemisega on vastuolus ka relatiivsusteooriaga. Selleks, et saada spinni õiget väärtust, peaks elektroni äärmiste punktide joonkiirus olema $\sim 300 c$ (nn. klassikaline elektroni raadius $\approx 10^{-13}$ cm).

Schrödingeri võrrandi lahendamisel spinn sisse ei tule. Teoreetiliselt tuleb ta sisse relativistliku Schrödingeri võrrandi, s.o. Diraci võrrandi lahendamisel. Spinni olemasolu saab põhjendada ka mitterelativistlikus kvantmehaanikas lainefunktsiooni sümmeetriaomaduste kaudu. Selgub, et elektronil peab lisaks kolmele ruumilisele vabadusastmele olema veel üks sisemine vabadusaste. Sellele vastabki spinn.

Spinnil pole klassikalist analoogi. Spinn on kvantosa-kese sisemine omadus, mis iselcomustab teda samuti nagu näiteks mass ja laeng.

Täielik kvantarvude süsteem

Elektroni spinn võib olla orienteeritud kahel viisil. Need kaks orientatsioonitähendavad elektroni erinevaid olekuid. Seetõttu elektroni iga olek aatomis (meil on esialgu

käsitletud ainult vesiniku aatom) jaguneb kaheks, n^2 oleku asemel (547) saame $2n^2$ erinevat olekut ja elektroni olek aatomis on määratud nelja kvantarvuga. Saame nn. täieliku kvantarvude süsteemi. Energia määrab peakvantarv.

$$E = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (556)$$

Orbitaalmomendi määrab orbitaalkvantarv.

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (l=0, 1, 2, \dots, n-1). \quad (557)$$

Orbitaalmomendi projektsiooni määrab magnetkvantarv.

$$L_z = m\hbar \quad (m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l). \quad (558)$$

Spinni projektsiooni määrab spinni kvantarv.

$$L_{sz} = m_s \hbar \quad (m_s = \pm \frac{1}{2}). \quad (559)$$

Kui $L = 0$, siis märk "+" valemis (559) tähendab, et spinn on ligikaudu samasuunaline välise magnetväljaga (või teiste elektronide väljaga); märk "-" tähendab, et spinn on välise väljaga ligikaudu vastassuunaline. Kui $L \neq 0$, siis märk "+" tähendab, et spinn on ligikaudu samasuunaline orbitaalmomendiga, märk "-" tähendab, et spinn on orbitaalmomendiga ligikaudu vastassuunaline. Kui kahel elektronil on m_s märkeid vastupidised, siis on nende spinnid vastassuunalised.

Ühesugused osakesed

Ühesugused osakesed on sellised osakesed, millel on ühesugune mass, laeng, spinn jt. sisemised karakteristikud.

Ühesugused on näiteks kõik elektronid, kõik ühesuguse sagedusega fotonid jne.

Ühesuguste osakeste eristamatuse printsiip

Osakeste süsteemi kvantteooria spetsiifiliseks iseärasuseks on ühesuguste osakeste põhimõtteline eristamatus.

Sellel printsiibil pole analoogi klassikalises mehaanikas. Selgitame seda näite varal. Oletame, et süsteem koos-

neb osakestest, millel on teatud ruumiline jaotus. Klassikalises füüsikas tähendab kahe osakese omavaheline vahetamine uut jaotust.

Teisiti: iga osake säilitab oma individuaalsuse. See tuleneb sellest, et klassikalises füüsikas on osakesel kindel trajektor ja kiirus, võime jälgida tema liikumist alg- hetkest alates. Mikroosakesel niisugused mõisted nagu kiirus ja trajektor puuduvad (määramatuse relatsioon). Seetõttu mikroosakeste süsteemi korral niisugune osakeste omavaheline vahetamine ei anna uut olekut, uut jaotust. Osakestel puudub individuaalsus. Mis tahes kahe osakese omavaheline vahetamine ei muuda ühtki süsteemi iseloomustavat suurust.

Sümmeetrilised ja antisümmeetrilised lainefunktsioonid

n ühesugusest osakesest koosneva süsteemi olekut kirjeldab kvantmehaanikas lainefunktsioon, mis sõltub kõigi osakeste koordinaatidest (ja spinnide orientatsioonist). Eristamatuse printsiibist järeldub, et on olemas kaht tüüpi süsteemi olekut kirjeldavaid lainefunktsioone: sümmeetrilised ja antisümmeetrilised. Sümmeetriline lainefunktsioon ei muuda oma märki, kui mis tahes kaks osakest süsteemis omavahel vahetada, antisümmeetrilise puhul märk muutub vastupidiseks. Rõhutame, et lainefunktsiooni märgi muutus ei tähenda süsteemi oleku muutust, kuna füüsikalist mõtet omab $|\Psi|^2$, see aga ei muutu, kui Ψ märk muutub.

Lainefunktsiooni sümmeetria ja osakese spinn

Algul tehti katseliselt kindlaks, seejärel aga tõestas Pauli teoreetiliselt, et lainefunktsiooni sümmeetria sõltub osakese spinnist.

Täisarvuliste spinnidega ühesuguste osakeste süsteemi lainefunktsioonid on sümmeetrilised, poolearvuliste spinnidega osakeste süsteemi lainefunktsioonid aga antisümmeetrilised.

Fermionid

Poolearvulise spinniga ($L_{sz} = \text{paaritu arv} \times \frac{\hbar}{2}$) osakeste statistika tõotasid välja Fermi ja Dirac. Selliseid osakesi nimetatakse fermionideks. Fermionid on näiteks elektronid,

prootonid, neutronid.

Bosonid

Täisarvulise spinniga ($L_{sz} = \text{paarisarv} \times \frac{\hbar}{2}$; ka 0 on paarisarv) osakeste statistika töötasid välja Bose ja Einstein. Selliseid osakesi nimetatakse bosoniteks. Bosonid on näiteks footonid, foononid, mesonid.

Pauli printsip

Fermionide kohta tõestas Pauli, et kaks või enam fermioni ei või olla ühesuguses olekus. Ühes olekus võib olla ainult üks fermion.

Sama printsip elektroni kohta aatomis:

aatomis ei või olla kahte või enamat elektroni ühesuguses statsionaarses olekus, s.t. kahele ega enamale elektronile ei või olla ühesugust kvantarvude nelikut. Ühes statsionaarses olekus võib olla ainult üks elektron.

Raskemate aatomite probleem

Aatomis, kus on mitu elektroni, tuleb peale tuuma ja elektroni vastastikuse mõju arvestada veel elektronide omavahelist mõju. Seejuures probleemi täpsel lahendamisel ei saa kvantmehaanikas põhimõtteliselt leida iga elektroni lainefunktsiooni eraldi. Niisugust süsteemi iseloomustab üks lainefunktsioon, mis sõltub kõigi elektronide koordinaatidest (ja spinnidest). Kuid juba kahe elektroniga aatomi korral pole Schrödingeri võrrand täpselt lahendatav. Seetõttu kasutatakse raskemate aatomite probleemi lahendamisel mitmesuguseid lähismeetodeid. Näiteks käsitletakse probleemi nii: iga elektron liigub tuuma ja teiste elektronide keskmistatud väljas. See väli pole enam kulooniline (ei kehti $f \sim \frac{1}{r^2}$), kuid ta on tsentraalsümmeetriline (jõud sõltub ainult elektroni kaugusest tuumast). Põhjendame seda. Sõltuvalt sellest, millese kauguseni elektron oma liikumisel tuumale läheneb, ekraneerivad teised elektronid tuuma välja erinevalt, tuuma mõju antud elektronile pole konstantne. Kuid kuna elektronid liiguvad aatomis suure kiirusega, võib ajas keskmistatud väl-

ja pidada tsentraalsümmeetriliseks.

Tuumalähedastele, nn. sisekatete elektronidele mõjub peamiselt tuuma kulooniline tõmbejõud, mida ainult nõrgalt ekraneerivad teised elektronid. Seda ekraneerimist võib küllalt täpselt arvestada, asendades tuuma laengu Z nn. efektiivse tuuma laenguga.

$$Z_{ef} = Z - \alpha, \quad (560)$$

kus α on nn. ekraneerimiskonstant ($\alpha \ll Z$).

Schrödingeri võrrandi lahendamine mittekuloonilises tsentraalsümmeetrilises väljas liikuva elektroni jaoks annab tulemused, mis on analoogsed vesiniku aatomi jaoks saadud tulemustega, s.t. olek on ikkagi määratud 3 kvantarvuga n, l, m , millele lisaks tuleb võtta spinni kvantarv m_s . Ouline erinevus vesiniku aatomiga võrreldes seisneb selles, et elektroni energia sõltub peale peakvantarvu n veel orbitaalkvantarvust l (esimeses lähenduses; täpsemas lähenduses ka m -st ja m_s -st; meie piirdume esialgu sellise lähendusega). Teisiti - kaob kõdunemine kvantarvu l järgi. Siin toimib üldine kvantmehaanika printsiip: häiritus kaotab kõdunemise. Põhiline on antud elektroni ja tuuma omavaheline mõju, teiste elektronide mõju on nõrgem, seda võib vaadelda kui häiritust, väikest lisamõju. Niisugune lisamõju kaotab kõdunemise.

Niisiis sõltub elektroni energia raskes aatomis n -st ja l -st, seejuures peamiselt sõltub energia n -st. Energia kasvab kvantarvu l kasvades. See sõltuvus on seda tugevam, mida suurem on l , nii et suurte l -de korral võib erandjuhtudel sõltuvus l -st osutada määravamaks kui sõltuvus n -st.

Energia sõltuvus kvantarvust l viib tasemete jagunemisele energiadiagrammil (võrreldes vesiniku aatomiga). Iga tase jaguneb n alltasemeks (l omab antud n korral n erinevat väärtust). Ei jagune ainult esimene tase ($l = 0$). Peale selle on tasemete vahekaugus raskemate aatomite energiadiagrammil suurem kui vesiniku aatomi energiadiagrammil ($E \sim Z^2, \Delta E \sim Z^2$).

Elektronkate

Elektronkattedeks nimetatakse niisuguste elektronide kogumit aatomis, millel on ühine peakvantarv. Katete tähi-
sed:

n	1	2	3	4	5	6	...
	K	L	M	N	O	P	...

Kate omakorda koosneb allkatetest (analoogselt: ener-
giatase koosneb alltasemetest). Allkate on ühesuguseid kvant-
arve n ja l omavate elektronide kogum.

K-, L-, M-, N-katte võimalikud olekud on toodud all-
järgnevas tabelis (meenutame, et iga olek on määratud nel-
ja kvantarvuga).

Kate	n	l	m	m_s	Allkate			
K	1	0	0	-1/2	K (1s)			
				+1/2				
L	2	0	0	-1/2	L ₁ (2s)			
				+1/2				
				1	-1	0	-1/2	L ₂ (2p)
							+1/2	
							-1/2	
							+1/2	
1	+1	0	-1/2					
			+1/2					
M	3	0	0	+1/2	M ₁ (3s)			
				-1/2				
				1	-1	0	-1/2	M ₂ (3p)
							+1/2	
							-1/2	
							+1/2	
							-1/2	
							+1/2	
				2	-2	-1	-1/2	M ₃ (3d)
							+1/2	
							-1/2	
							+1/2	
-1/2								
+1/2								
2	-1	0	-1/2					
			+1/2					
			-1/2					
			+1/2					
			-1/2					
			+1/2					
2	+1	0	-1/2					
			+1/2					
			-1/2					
			+1/2					
			-1/2					
			+1/2					
2	+2	0	-1/2					
			+1/2					
			-1/2					
			+1/2					
			-1/2					
			+1/2					

Kate	n	l	m	m_s	Allkate	
N	4	0	0	-1/2	N_1 (4s)	
				+1/2		
		1	-1	0	-1/2	N_2 (4p)
					+1/2	
					-1/2	
					+1/2	
					-1/2	
					+1/2	
		2	-2	0	-1/2	N_3 (4d)
					+1/2	
					-1/2	
					+1/2	
					-1/2	
					+1/2	
		3	-3	0	-1/2	N_4 (4f)
					+1/2	
-1/2						
+1/2						
-1/2						
+1/2						
-1/2						
+1/2						
-1/2						
+1/2						

Olekute realiseerumine

Elektronide olekute realiseerumise aatomites ehk taseme täitumise määravad kaks põhiprintsiipi.

1. Energia miinimumi printsiip. Põhiolekus (ergastamata olekus) peavad kõik elektronid paiknema kõige madalamatel võimalikel energiatasemetel.

Kui kehtiks ainult see printsiip, oleksid kõik elektronid kõigis aatomites tasemel K e. 1s.

2. Pauli printsiip. Ühes olekus võib olla ainult üks elektron.

Mendelejevi perioodilisuse süsteem

Vaatleme olekute realiseerumist ehk perioodilisuse süsteemi. Vesiniku aatomis ($Z=1$) paikneb ainuke elektron olekus $1s$, kusjuures spinni orientatsioon on meelevaldne.

He ($Z = 2$). Mõlemad elektronid paiknevad olekus $1s$. Nende spinnid on vastassuunalised, ühtlasi on K-kate täidetud. Täidetud kate (või allkate) puhul on aatom eriti stabiilne. He on inertgaas. Nn. elektronide konfiguratsioon: $1s^2$ (indeks ülal näitab elektronide arvu antud olekus).

Alates Li-st ($Z = 3$) algab L-katte täitumine (K-kate jääb täidetuks), kusjuures olekud realiseeruvad just tabelis toodud järjekorras, kuna energia kasvab selles järjekorras. Li-1 on väliskattes üks elektron, s.o. tal on üks valents-elektron. See elektron on tuumaga nõrgalt seotud. See määrab tema keemiliste omaduste sarnasuse H-ga. L-kattesse "mahub" $2n^2 = 8$ elektroni. Katte täitumine lõpeb Ne-ga ($Z = 10$), lõpeb ka 2. periood. Elektronide konfiguratsioon: $1s^2 2s^2 2p^6$. Ne on jällegi inertgaas.

Na ($Z = 11$) 11. elektron läheb M-kattesse. Na on ühevalentne. Elektronide konfiguratsioon: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.

Mg-1 ($Z = 12$) on 2 elektroni M-kattes. Ta on 2-valentne. Niiviisi regulaarselt läheb olekute realiseerumine kuni Ar-ni ($Z = 18$). Ar-1 on allkate $3p$ täidetud. Ta on inertgaas. Elektronide konfiguratsioon: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$.

M-kattesse peaks "mahtuma" $2n^2 = 18$ elektroni, kuid tegelikult on ka kolmandas perioodis 8 elementi. Siin hakkabki mõju avaldama see, et energia sõltub mitte ainult peakvantarvust n , vaid ka orbitaalkvantarvust l , seejuures energia kasvab l kasvades. Seetõttu osutub, et allkate $4s$ energia on väiksem kui allkate $3d$ energia. Vastavalt energia miinimumi printsiibile läheb K($Z = 19$) 19. elektron allkattesse $4s$, algab N-katte täitumine, kusjuures M-kate jääb osaliselt täitmata. Alates Sc-st ($Z = 21$) hakkab "takka järgi" täituma allkate $3d$ (ikka vastavalt energia miinimumi printsiibile). Cu-1 ($Z = 29$) on M-kate täielikult täidetud ja üks elektron N-kattes.

Täiesti analoogne olukord tekib "hiljem" M-katte täitumisel.

Elementide omaduste perioodilisus on tingitud sellest, et elektronide arv katetel on piiratud. Omadustelt on sarnased elemendid, millel on väliskattes ühesugune arv elektrone (valentselektrone) või katte (või allkatte) täitumisest ühesugune arv elektrone puudu. Iga perioodi viimasel elemendil on p-allkate täielikult täidetud.

Vesiniku aatomi kiirgus- ja neeldumisspekter

Eespool on käsitletud vesiniku aatomi kiirgus- ja neeldumisspekter. Spekter on joonspekter. Spektraaljoonte ringsagedused:

$$\omega = R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \quad (561)$$

kus R on Rydbergi konstant. Ühel seerial $n_1 = \text{const}$ ja $n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots$

Vesinikusarnaste ioonide kiirgus- ja neeldumisspektrid

Vesinikusarnastel ioonidel erinevad energiatasemed vesiniku aatomite energiatasemetest Z^2 korda. Nende spektraaljoonte ringsagedused:

$$\omega = Z^2 R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right). \quad (561e)$$

Seega spektraalsed seeriad on vesiniku seeriade suhtes nihutatud. Juba $Z > 10$ korral langevad esimeste seeriade sagedused röntgenikiirguse piirkonda. Kuid suure n_1 korral on igasuguse Z korral olemas jooned, mis paiknevad spektri nähtavas ja infrapunases piirkonnas.

Leelismetallide kiirgus- ja neeldumisspektrid

Küllalt lähedased vesiniku spektrile on nn. leelismetallide spektrid. Nende aatomite väliskattes on üks elektron, kusjuures sisekatted (või allkatted) on täielikult täidetud. Kiirgus ja neeldumine on seotud just selle väliskatte elektroni üleminekutega. Selle elektroni põhi- ja ergastatud ole-

kute tasemed on üsnagi sarnased vesiniku aatomi tasemetega, kuid erinevad viimastest kahes suhtes: 1) tasemed on kõrgemal kui vesiniku tasemed; madalamatele, täidetud tasemetele ei saa elektron minna Pauli printsiibi tõttu; 2) nad on nihutatud vesiniku tasemete suhtes, kuna elektroni energia sõltub peale peakvantarvu n veel orbitaalkvantarvust l .

Näiteks Na: olekud $1s$, $2s$, $2p$ on täidetud sisekatete elektronidega. Valentselektroni põhiolekuks on olek $3s$. Ergastamisel võib see elektron üle minna olekutesse $3p$, $3d$, $4s$, $4p$, $4d$, $4f$ jne. Spektraalsed sagedused on küllalt täpselt määratud valemiga:

$$\omega = R \left[\frac{1}{(n_1 - a_{l_1})^2} - \frac{1}{(n_2 - a_{l_2})^2} \right], \quad (562)$$

kus $n_1 = 3, 4, \dots$ (ühe seeria korral jääv). a_l on parandustegur, mis sõltub l -st:

1	a_1
0	1,35
1	0,85
2	0,01
3	0,00

Spinn-orbitaalne vastasmõju

Leelismetallide spektrite uurimine suure lahutusvõimega spektraalriistadega näitas, et iga joon on tegelikult dublett (kahekordne). Näiteks Na kollase joone ($3p \rightarrow 3s$) lainepikkused: $\lambda_1 = 5890 \text{ \AA}$, $\lambda_2 = 5896 \text{ \AA}$. Spektraaljoonte dubletsus osutab energiatasemete lõhenemisele väga lähedasteks tasemeteks. Selle põhjuseks on elektroni spinn ja sellega seotud omamagnetmoment μ_s . Tänu omamagnetmomendile käitub elektron nagu "magnetdipool" (ringvool), mis asub sama elektroni orbitaalsest liikumisest tingitud magnetväljas. Teisiti: omamagnetmoment ja orbitaalne magnetmoment mõjutavad teineteist. Tänu sellele vastasmõjule saab elektron lisaenergia. Kuna omamagnetmoment võib orbitaalse magnetmomendi suhtes olla orienteeritud kahel viisil (ligikaudu p

ri- või vastassuunaliselt), siis jagunebki energiatase kaheks. Niisugust spinni ja orbitaalse momendi vastasmõju nimetatakse lühidalt spinn-orbitaalseks vastasmõjuks. Ei jagune ainult tasemed, millel $l = 0$. Spinn-orbitaalse vastasmõju tõttu lõhestuvad ka teiste, keerukamate aatomite energiatasemed.

Keerukamate aatomite kiirgus- ja neeldumisspektrid

Mitme valentsielektroniga aatomite kiirgus- ja neeldumisspektrid on küllalt keerukad ja neid me lähemalt ei käsitle. Viitame vaid mõnele asjaolule. Valentsielektronide potentsiaalne energia on samas suurusjärgus elektroni potentsiaalse energiaga vesiniku aatomis, kuid potentsiaalne energia sõltub elektroni ja tuuma vahelisest kaugusest teisiti. Erinevate aatomite valentsielektronide energiatasemed paiknevad üldjuhul erinevalt, kuid tasemetevahelised kaugused on suuruselt võrreldavad ja varieeruvad ligikaudu 10 eV-st kuni mõne kümnendiku eV-ni. Sellele vastavad kiirgus- ja neeldumisjoonte sagedused spektri nähtavas ja infrapunases piirkonnas. Kõik atomaarsed spektrid on joonspektrid.

Röntgenispektrid

Aatomid kiirgavad mitte ainult valentsielektronide üleminekute tõttu. Aatomit võib ergastada ka sel teel, et eraldada elektron ühelt sisemiselt, täidetud kattelt. Seda võib teha näiteks "pommitades" aatomit piisava energiaga elektronidega. Pärast niisugust ergastamist kiirgab aatom energiat elektronide üleminekutel kõrgematelt tasemetelt vabadesse olekutesse.

Sügavates katetes (K, L jne.) on elektronid tugevasti seotud tuumaga. Seetõttu nende energia praktiliselt ei muutu, kui aatomid ühinevad molekulideks või kristalliks. Sügavate katete elektronidele mõjub peamiselt tuuma kulooniline tõmbejõud, mida ainult nõrgalt ekraneerivad teised elektronid. Üleminekutele vastavad ringsagedused:

$$\omega = (Z - s)^2 R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (563)$$

kus s on ekraneerimiskonstant.

Raskemat aatomite korral paiknevad spektrijooned röntgenikiirguse piirkonnas. Sellisel viisil tekkivat röntgenikiirgust nimetatakse karakteristikuks kiirguseks, kuna tema spekter on iseloomulik antud aatomile. Ka röntgenikiirguse seeria tekib üleminekutel kõikvõimalikelt kõrgematelt tasemetelt antud tasemele. Seeriaid nimetatakse selle taseme järgi, millele üleminek toimub (K-, L-seeria jne.).

Valikureeglid

Tasemete vahelised üleminekud alluvad nn. valikureeglitele. Lubatud pole mitte kõik üleminekud, vaid ainult sellised, mille korral orbitaalkvantarv l muutub ühe võrra:

$$\Delta l = \pm 1. \quad (564)$$

Sisuliselt kajastab valikureegel (564) impulsimomendi jäävust. Asi on selles, et footon omab omaimpulsimomenti ehk spinni, mille väärtus on \hbar (täpsemini - projektsioon eelistatud suunale on $\pm \hbar$).

Lubatud ja keelatud üleminekud

Üleminekuid, mis toimuvad vastavalt valikureeglitele, nimetatakse lubatuteks. Kui aatom on ergastatud ja lubatud üleminek on võimalik, siis aatomi eluiga ergastatud olekus on $\sim 10^{-8}$ s.

Väiksema tõenäosusega võivad toimuda ka üleminekud, mille korral

$$\Delta l = 0, \pm 2. \quad (565)$$

Sel juhul tagatakse impulsimomendi jäävus spinni orientatsiooni muutusega. Selliseid üleminekuid nimetatakse keelatuteks.

Metastabiilne olek

Kui ergastatud olek realiseeritakse keelatud ülemineku teel, siis on aatomi ergastatud oleku aeg märksa pikem - 10^{-3} s. Selliseid ergastatud olekuid nimetatakse metastabiilseteks olekuteks.

Kui aatom on ergastatud olekus, kuid tema üleminek normaalolekusse on keelatud valikureeglitega, siis on ta me-

tastabiilses olekus.

Lihtne Zeemani efekt

Kui paigutada aatomid magnetvälja, siis nende energiatasemed ja spektraaljooned lõhestuvad. Selle põhjuseks on asjaolu, et magnetväljas omandab aatom täiendava energia, mis sõltub impulsimomendi (ja koos sellega magnetmomendi) orientatsioonist. Ühest energiatasemest tekib mitu ja tekivad uued spektraalsed sagedused. Niisugust nähtust nimetatakse avastaja järgi Zeemani efektiks.

Meenutame, et elektroni orbitaalne magnetmoment on seotud orbitaalse impulsimomendiga:

$$\vec{p}_m = - \frac{e}{2m_e c} \vec{L}. \quad (566)$$

Magnetmomendil on magnetväljas energia:

$$\Delta E = - \vec{p}_m \cdot \vec{B} = -p_{mz} B, \quad (567)$$

kus p_{mz} on magnetmomendi projektsioon magnetvälja suunale.

$$p_{mz} = - \mu_B m, \quad (568)$$

kus m on magnetkvantarv. Seega

$$\Delta E = \mu_B B m (m=0, \pm 1, \dots \pm l). \quad (569)$$

Sellise täiendava energia saab elektron magnetväljas. Energiatase E_{nl} lõhestub magnetväljas $(2l+1)$ -ks üksteisest võrd- sel kaugusel olevaks tasemeks. Kaugus naabertasemete vahel

$\Delta E_0 = \mu_B B$. Magnetväli kaotab kõdunemise kvantarvu m järgi (häiritus kaotab kõdunemise). Lõhestuvad ka spektraaljooned. Kuna üleminekute jaoks kehtib valikureegel $m=0, \pm 1$, siis

$$\Delta \omega = \frac{\Delta E_0}{\hbar} = \frac{\mu_B B}{\hbar}. \quad (570)$$

See on nn. lihtne Zeemani efekt. Nii lõhestuvad vaid vähesed spektraaljooned. Üldjuhul on lõhestumine keerukam.

Paramagnetiline resonants

Tüüpilistes laboratoorsetes tingimustes $B \approx 10^4$ Gs, $\Delta E_0 \approx 0,5 \cdot 10^{-4}$ eV ja nn. Lorentzi nihe

$$\Delta \nu = \frac{\Delta \omega}{2\pi} = \frac{\Delta E_0}{2\pi \hbar} \approx 10^{10} \text{ Hz.}$$

Selline sagedus vastab raadiolainete sagedusele. Seetõttu toimuvad magnetväljas paiknevatel aatomitel üleminekud nn. Zeemani alltasemete vahel raadiosagedusliku välja toimel. Paramagnetilistes keskkondades ($l \neq 0$) kutsuvad need üleminekud esile nn. paramagnetilise resonantsi nähtuse, mis seisneb selles, et jäävasse magnetvälja paigutatud paramagneetiku aatomid neelavad raadiosagedusliku välja energiat ainult kindlatel sagedustel:

$$\omega_{\text{res}} = \Delta \omega = \frac{\mu_B B}{\hbar}. \quad (571)$$

Rõhutame, et resonantsi korral antakse energiat mitte ainult väljalt paramagneetikule, vaid ka vastupidi (üleminekutel kõrgematelt Zeemani alltasemetelt madalamatele). Kuid kuna soojusliku tasakaalu korral madalama energiaga aatomeid on märksa rohkem kui kõrgema energiaga aatomeid, siis on ülekaalus neelamine. Selle tulemusena paramagneetik soojeneb.

Paramagnetilise resonantsi abil võib katseliselt määrata aatomite magnetmomente.

Tihedates keskkondades (vedelikud, tahked kehad) pole aatomid üksteisest isoleeritud, vaid nad on vastasmõjus. See vastasmõju muudab Zeemani alltasemete vahelist kaugust - tekib tasemete täiendav lõhestumine, mille tõttu paramagnetilise resonantsi jooned laienevad (üksikuid peenstruktuuri jooni enam eristada pole võimalik). Seetõttu osutub paramagnetiline resonants efektiivseks meetodiks osakeste vastasmõju ja üldse aine ehituse uurimisel tahkes ja vedelas olekus.

Aatomitevahelised sidemed molekulides

Aatomeid molekulides koos hoidvad jõud on põhjustatud

väliskatete elektronidest - valentsielektronidest. Sisekatete elektronid jäävad ainult oma tuuma mõju alla, seda nii molekulis kui kristallivõres olevate aatomite korral. Seda näitab asjaolu, et elementide röntgenspektrid ei sõltu sellest, millisesse keemilisse ühendisse kuulub antud element.

Aatomid võivad molekulides olla seotud põhiliselt kahe sidemetüübi abil.

1. Kovalentne e. homöopolaarne side

Valentsielektronid kuuluvad samaaegselt mõlemale (piirdume kaheaatomiliste molekulidega) aatomile. Teisiti: valentsielektronide elektronpilved kattuvad osaliselt. Kvantmehaanikas näidatakse, et sel juhul tekib nn. vahetusenergia, mille märk oleneb elektronide spinnide orientatsioonist: Kui spinnid on paralleelsed, on energia positiivne (tõukejõud) ja molekuli ei saa moodustuda; kui spinnid on antiparalleelsed, on energia negatiivne (tõmbejõud) ja moodustub molekuli. Sel juhul omab molekuli energia (mis arvestab nii elektronide omavahelist, tuumade omavahelist kui elektronide ja tuumade vahelist mõju) sõltuvus tuumadevahelisest kaugusest miinimumi kohal, mis vastab tuumadevahelisele tasakaalulisele kaugusele molekulis.

2. Ioonne e. heteropolaarne side

See side teostub aatomite vahel, millest ühel on väliskattes üks elektron, teisel katte täitumisest üks elektron puudu (näit. NaF). Esimene aatom annab oma ainsa valentsielektroni kergesti ära, teine võtab selle "meelsasti" juurde. Sidet võib seetõttu vaadata kui tõmbejõudu kahe vastasmärgilise iooni vahel. Arvutus näitab, et niisugune ühinemine on energeetiliselt kasulik, s.t. molekuli moodustumisel vabaneb energia. Energia sõltuvus tuumadevahelisest kaugusest on analoogne eeltooduga.

Molekuli energia

Eespool kirjeldatud energia sõltub elektronide paigutusest e. konfiguratsioonist. Nimetame seda lühidalt elektronenergiaks (E_e). Elektronide konfiguratsiooni muutumisel (molekuli ergastamisel) muutub ka elektronenergia kõvera

kuju. Molekuli energia, nagu aatomi energiagi muutub peamiselt väliskatte elektronide konfiguratsiooni muutumise tõttu. Loomulikult on see energia kvanditud.

Peale elektronenergia võib molekul omada energiat veel seetõttu, et tuumad võivad molekulis võnkuda (E_v) ja pöörelda ühise massikeskme ümber (E_r).

Seega molekuli statsionaarse oleku energia

$$E = E_e + E_v + E_r. \quad (572)$$

Kõik need energiad on kvanditud. Nagu näitavad arvutused, on suuruselt

$$E_e \gg E_v \gg E_r.$$

Võnkeenergia on harmoonilise ostsillaatori energia:

$$E_v = (n + 1/2) \hbar \omega_0, \quad (573)$$

kus võnkekvantarv $n = 0, 1, 2, \dots$; ω_0 on omavõnkeringsagedus. Üleminekute jaoks kehtib valikureegel

$$\Delta n = \pm 1. \quad (574)$$

Seega võnkeenergia võib muutuda annuste $\hbar \omega_0$ kaupa.

Pöörlemisenergia

$$E_r = \frac{I \omega_r^2}{2} = \frac{(I \omega_r)^2}{2I} = \frac{L^2}{2I}, \quad (575)$$

kus I on molekuli inertsimoment massikeskme suhtes;

ω_r - pöörlemise nurkkiirus;

L - impulsimoment.

Impulsimoment on kvanditud samuti kui elektroni impulsimoment aatomis, s.t.:

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

kus pöörlemiskvantarv $l = 0, 1, 2, \dots$

Pöörlemisenergia

$$E_r = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}. \quad (577)$$

Tasemete vaheliste üleminekute kohta kehtib valikureegel

$$\Delta l = \pm 1.$$

Arvutused näitavad, et tasemetevahelised kaugused

$$\Delta E_e \gg \Delta E_v \gg \Delta E_r.$$

Arvestades kõiki neid energiasid, kujuneb molekuli energiadiagramm järgmiseks: iga elektronenergia tase jaguneb võnkeenergia alltasemeteks, kusjuures kõik need alltasemed paiknevad vastavast elektronenergia tasemest kõrgemal (võnkeenergia on positiivne); iga võnkeenergia tase jaguneb omakorda pöörlemisenergia alltasemeteks, mis samuti paiknevad vastavast võnkeenergia tasemest kõrgemal.

Molekulide kiirgus- ja neeldumisspektrid

Molekulide kiirgus- ja neeldumisspektrid tekivad molekuli ülalkirjeldatud energiatasemete vahelistel üleminekutel, arvestades valikureegleid. Peaks olema selge, et molekuli spektrid erinevad tunduvalt aatomite spektritest. Kui aatomite spektrid koosnevad üksikutest joontest, siis molekuli spektrid koosnevad ribadest, mille üks äär on terav, teine aga hajuv. Riba teravat äärt nimetatakse riba kandiks. Riba ise koosneb samuti üksikutest joontest, kusjuures kandi suunas joonte tihedus kasvab, nii et üksikud jooned seal on eristatavad vaid väga suure lahutusvõimega spektroskoobis. Ribad esinevad nii spektri infrapunases, nähtavas kui ultravioletses osas. Kant võib asuda nii riba pikalainelisel kui lühilainelisel poolel.

Ribad paiknevad spektris teatud korrapärasuse järgi, moodustades ribade seeriaid. Spektris on üldjuhul palju seeriaid. Sageli üksikud ribad ja isegi ribade seeriad kattuvad.

Seega on molekuli spektrid tunduvalt keerukamad kui aatomite spektrid, mis on tingitud molekuli keerukamast ehitusest.

Meie vaatlesime kaheaatomilist molekuli. Enama-aatomiliste molekuli spektrid on veelgi keerukamad.

Valguse kombinatsioonhajumine

Nähtus seisneb selles, et monokromaatse valguse läbiminekul gaasidest, vedelikest ja läbipaistvatest kristallidest on läbiläinud valguse spektris (hajumisspektris) lisaks langeva valguse ringsagedusele ω_0 veel jooned, mis kujutavad endast kombinatsiooni ω_0 -st ja hajutavate molekulide võnketasemete ja pöörlemistasemete vahelistele üleminekutele vastavatest ringsagedustest ω_i :

$$\omega = \omega_0 \pm \omega_i. \quad (578)$$

Siit ka nimetus - kombinatsioonhajumine. Lisajooned paiknevad sümmeetriliselt nihkumata joone ω_0 suhtes. Igale "punasele" kaaslasele $\omega_0 - \omega_i$ vastab "violettne" kaaslane $\omega_0 + \omega_i$. Tavalistel temperatuuridel on "violettsete" kaaslaste intensiivsus palju väiksem "punaste" kaaslaste intensiivsusest. Temperatuuri tõusul kasvab "violettsete" kaaslaste intensiivsus kiiresti.

Valguse hajutamist molekulide poolt võib vaadata kui footonite mitteelastset põrget molekulidega. Põrkel võib footon molekulile ära anda või temalt juurde saada energiahulga, mis vastab molekuli energiatasemete vahele. Kui põrkel footoniga siirdub molekul olekust energiaga E_1 olekusse energiaga E_2 ($E_2 > E_1$), siis footoni energia peale hajumist $\hbar\omega = \hbar\omega_0 - \Delta E$ ($\Delta E = E_2 - E_1$). Footoni ringsagedus väheneb $\omega_i = \frac{\Delta E}{\hbar}$ võrra. Tekib "punane" kaaslane. Kui algsest oli molekul olekus energiaga E_2 , siis võib ta põrkel footoniga minna olekusse E_1 . Sel juhul saab footon juurde energia $\Delta E = E_2 - E_1$. Footoni energia pärast hajutamist $\hbar\omega = \hbar\omega_0 + \Delta E$ ja tema ringsagedus kasvab ω_i võrra. Footonite hajutamisel võivad esineda üleminekud mitmesugustele võnke- või pöörlemistasanditele, mille tulemusena tekib mitu ω_0 -ga sümmeetriliselt paiknevat kaaslast.

Kuna tavalistel temperatuuridel on ergastatud olekus

olevate molekulide arv palju väiksem põhiolekus olevate molekulide arvust, siis toimuvad pörked, mille korral molekuli energia suureneb, tunduvalt sagedamini pörgetest, mille korral molekuli energia väheneb. Sellega on seletatav "punaste" kaaslaste märgatavalt suurem intensiivsus, võrreldes "violetssete" kaaslastega. Temperatuuri tõusuga kasvab ergastatud molekulide arv ja koos sellega "violetssete" kaaslaste intensiivsus. Joonte paigutus kombinatsioonhajumise spektris erineb nende paigutusest molekulide kiirgusspektris, kuna valikureeglid on teistsugused.

Kombinatsioonhajumise spektrite abil saab määrata molekulide omavõnkesagedusi, saab otsustada molekulide sümmeetria üle. Kombinatsioonhajumise spekter on igale molekuli niivõrd iseloomulik, et selle abil saab läbi viia väga keerukate molekulide, eriti orgaaniliste molekulide analüüsi, mis keemiliste meetoditega on sageli võimatu.

Neeldumine, spontaanne ja indutseeritud kiirgus

Kui aatom on ergastatud olekus ja ta iseenesest, ilma väliste mõjutusteta läheb üle normaalolekusse, kiirates kvandi, siis on tegemist spontaanse kiirgusega. Spontaansed üleminekud võivad toimuda ainult ühes suunas - kõrgemalt energiatasemelt madalamale, mille tulemusena kiiratakse kvant energiaga

$$\hbar\omega = E_2 - E_1 (E_1 < E_2), \quad (579)$$

kus E_1 on aatomi energia põhiolekus (või lihtsalt väiksem energia), E_2 - ergastatud olekus.

Peale spontaansete üleminekute võivad toimuda indutseeritud üleminekud, mida kutsutakse esile aatomile langenud kiirgus. Seejuures indutseeritud üleminekud võivad toimuda ühesuguse tõenäosusega nii ühes kui teises suunas. Kui aatomile olekus energiaga E_1 langeb kvant energiaga $\hbar\omega$, siis võib ta üle minna olekusse energiaga E_2 . See on neeldumine. Kui aatom on olekus energiaga E_2 , siis kvandi $n\omega$ mõjul võib ta üle minna olekusse E_1 . See on indutseeritud e. sunnitud kiirgus. Seejuures tuleb rõhutada, et mõlemad protses-

sid toimuvad ühesuguse tõenäosusega. Indutseeritud kiirguse korral tekib lisaks kvandile, mis selle kiirguse esile kut- sus, veel üks kvant, millel on täpselt sama suund, sagedus, faas ja polarisatsioon, lühidalt - indutseeritud kiirgus on koherentne teda esilekutsunud kiirgusega. Indutseeritud kiirgus on neeldumise pöördprotsess.

Einsteini kiirgus- ja neeldumisteooria, Plancki valem

Tasemete vaheliste üleminekute seletamiseks ei piisa ainult kvantmehaanika seadustest. Neid seletab kvantelekt- rodünaamika. Kuid juba enne kvantmehaanika teket lõi Ein- steini kiirgus- ja neeldumisteooria, tuginedes energia ja impulsi jäävuse seadustele kvantsüsteemide ja elektromagnet- välja vastasmõjul.

Tutvume selle teooriaga ja tuletame selle põhjal Plan-cki valemi absoluutselt musta keha kiirgusvõime kohta.

Tõenäosus, et aatom siirduks ajaühiku jooksul energia- tasemelt E_1 energiatasemele E_2 (olekust 1 olekusse 2; $E_2 > E_1$) on võrdeline välise elektromagnetvälja energia ruumtihedu- sega $\rho(\omega)$:

$$P_{12} = B_{12} \rho(\omega). \quad (580)$$

$\rho(\omega)$ on energia ruumalaühikus, mis tuleb ringsageduste ühikulise vahemiku kohta antud ω läheduses. B_{12} on võrdete- gur, nn. Einsteini konstant.

Kui olekus 1 on N_1 aatomit, siis ajaühikus üleminekut $1 \rightarrow 2$ sooritavate aatomite arv (kvante neelavate aatomite arv)

$$\Delta N_{12} = P_{12} N_1 = B_{12} \rho(\omega) N_1. \quad (581)$$

Täpselt analoogselt avaldub üleminekut $2 \rightarrow 1$ ajaühi- kus sooritavate aatomite arv (indutseeritud kiirgust väljas- tavate aatomite arv):

$$\Delta N_{21} = P_{21} N_2 = B_{21} \rho(\omega) N_2, \quad (582)$$

kus N_2 on olekus 2 olevate aatomite arv. Nagu eespool rõhu- tatud, on mõlema protsessi tõenäosus ühesugune, s.t. $B_{12} = B_{21}$.

Kiirguse ja aine tasakaal saabub tingimisel, et aatomite arv igas olekus N_i jääb muutumatuks. See aga on võimalik vaid siis, kui üleminekut $1 \rightarrow 2$ sooritavate aatomite arv võrdub üleminekut $2 \rightarrow 1$ sooritavate aatomite arvuga. Kui $E_2 > E_1$, siis üleminekud $1 \rightarrow 2$ võivad toimuda vaid kiirguse mõjul. Üleminek $2 \rightarrow 1$ aga võib toimuda nii indutseeritult kui spontaanselt. Spontaanset üleminekut $2 \rightarrow 1$ ajaühikus sooritavate aatomite arv $\Delta N'_{21}$ on võrdeline olekus 2 olevate aatomite arvuga N_2 :

$$\Delta N'_{21} = A_{21} N_2. \quad (583)$$

Nn. detailse tasakaalu printsiibi kohaselt vastavad statistilises tasakaalus olevas süsteemis üleminekutele $1 \rightarrow 2$ sama tõenäosusega üleminekud $2 \rightarrow 1$.

Tasakaalu korral peab:

$$\Delta N_{12} = \Delta N_{21} + \Delta N'_{21}. \quad (584)$$

Asendades ΔN -de avaldised (584)-sse, saame:

$$B_{12} \rho(\omega) N_1 = B_{12} \rho(\omega) N_2 + A_{21} N_2. \quad (585)$$

Kuna tasakaalse energia ruumtihedus sõltub peale sageduse veel temperatuurist, siis asendame $\rho(\omega)$ $\rho(\omega, T)$ -ga. Avaldame selle (585)-st:

$$\rho(\omega, T) = \frac{A_{21} N_2}{B_{12} (N_1 - N_2)} = \frac{A_{21}}{B_{12}} \frac{1}{\frac{N_1}{N_2} - 1}. \quad (586)$$

Edasi arvestame, et aatomite jaotus energiatega järgi allub Boltzmanni jaotusseadusele:

$$\begin{aligned} N_1 &= N_0 e^{-\frac{E_1}{kT}}, \\ N_2 &= N_0 e^{-\frac{E_2}{kT}}, \end{aligned}$$

ning

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{\frac{E_2 - E_1}{kT}} = e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}. \quad (587)$$

Paigutades viimase (586)-sse, saame:

$$\rho(\omega, T) = \frac{A_{21}}{B_{12}} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (588)$$

Kordaja $\frac{A_{21}}{B_{12}}$ määramiseks kasutame Bohri vastavuse printsiipi:

iga teooria, mis on klassikalise teooria edasiarenduseks, peab piirjuhul üle minema klassikaliseks teooriaks. Selliseks piirjuhuks antud juhul on $\hbar\omega \ll kT$. Kvandi energia on nii väike, et kiirgust võib vaadata pidevana (pikalaineline kiirgus). Sel juhul

$$e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}$$

ja

$$\rho(\omega, T) = \frac{A_{21}}{B_{12}} \frac{kT}{\hbar\omega}. \quad (589)$$

Vastava klassikalise avaldise, mille tuletamisel eeldatakse, et aatom kiirgab pidevalt, annab Rayleigh-Jeans'i valem:

$$\rho(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT. \quad (590)$$

Viimaste võrdlemisest saame:

$$\frac{A_{21}}{B_{12}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \quad (591)$$

Paigutades selle (588)-sse, saame:

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}. \quad (592)$$

Edasi läheme energia ruumtiheduselt üle monokromaatsele kiirgusvõimele. Kui keha (pind) ainult kiirgaks ja kiirgaks ühes suunas, oleks

$$\bar{r}_{\omega, T} = c \rho(\omega, T).$$

Tegelikult kiirgusvõime annab energia, mida pinnauhik kiirgab kõigis suundades, peale selle tasakaalu korral langeb pinnale (pind neelab) sama palju energiat, kui ta kiirgab. Seetõttu tegelik seos tuleb:

$$\bar{r}_{\omega, T} = \frac{c}{4} \rho(\omega, T). \quad (593)$$

Seega

$$\bar{r}_{\omega, T} = \frac{\hbar \omega^3}{4 \pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}, \quad (594)$$

Viimane avaldis ongi Plancki valem absoluutselt musta keha kiirgusvõime kohta [vt. (460)].

Laser

Valguse kvantgeneraator e. laser on seade, mis võib kiirata võimsaid kitsaid, paralleelseid, monokromaatseid, koherentseid valguskiirte kimpe.

Laseri töö tugineb indutseeritud kiirguse ja metastaabiilsete olekute kasutamisel.

Eelneva põhjal: kui ainele langeb valgus ringsagedusega

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}, \quad (595)$$

kus E_1, E_2 on aatomi energiatasemed ($E_2 > E_1$), siis on võimalikud kaks protsessi:

1) footonite $\hbar \omega$ neeldumine, mille tulemusena aatom lähneb olekust 1 üle olekusse 2;

2) indutseeritud kiirgus ($2 \rightarrow 1$).

Esimene protsess põhjustab langeva valguse intensiivsuse vähenemise, teine - suurenemise.

Termodünaamilise tasakaalu tingimustes allub aatomite jaotus energiatega järgi Boltzmanni jaotusseadusele:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}} \quad (596)$$

Kui $E_2 > E_1$, siis $\frac{N_2}{N_1} < 1$, s.t. suurema energiaga tasemel on

tasakaalu korral aatomeid vähem kui madalama energiaga tasemel ehk: energia kasvamisel taseme hõive väheneb. Kahe taseme vaheliste üleminekute arv on aga võrdeline lähtetasemete hõivega (aatomite arvuga lähtetasemel). Seega termodünaamilise tasakaalu korral on neeldunud fotonite arv suurem indutseeritult kiiratud fotonite arvust ja valguse intensiivsus ainst läbiminekul väheneb. Selleks et saada valguse võimendamist, tuleb mingil viisil tekitada olukord, et kõrgemal tasemel E_2 oleks rohkem aatomeid kui madalamal tasemel E_1 . Sellist olukorda nimetatakse pöördhõiveks. Pöördhõive

korral $\frac{N_2}{N_1} > 1$ ($E_2 > E_1$). Selline olukord pole enam tasakaaluline.

Aines, milles on energiatasemete pöördhõive, võib indutseeritud kiirgus ületada neeldumise, mistõttu valgus sellisest ainst läbiminekul võimendub. Laseri praktiline teostamine saigi võimalikuks pärast seda, kui leiti pöördhõive tekitamise meetodid.

Vaatame laseri tööd rubiinikristalli näite põhjal (rubiin oli ka esimese laseri töökehaks). Rubiin on alumiiniumoksiid (Al_2O_3), milles osa alumiiniumi aatomeid on asendatud kroomiaatomitega. Ergastusenergia saadakse gaaslahenduslambilt, mis töötab impulsrežiimis (10^{-3} s).

Lihtsustatud skeemi järgi osaleb laseri töös kroomiaatomi neli energiataset: E_1, E_2, E_3, E_4 ($E_1 < E_2 < E_3 < E_4$). E_1 on

põhitase - sellel asub valentsielektron aatomi põhiolekus. Kaugus tasemete $E_1 - E_2$ vahel on märksa suurem kui kaugus tasemete $E_2 - E_3$ ning $E_3 - E_4$ vahel. Gaaslahenduslambi kiirguse abil viiakse kroomiaatomid ergastatud olekutesse 3 või 4. Aatomi eluiga nendes olekutes on $10^{-7} \dots 10^{-8}$ s. Selle aja jooksul siirduvad mõned aatomid spontaanselt normaalolekusse 1, kuid selliste üleminekute tõenäosus on väike, võrreldes üleminekutega $4 \rightarrow 2$, $3 \rightarrow 2$. Viimased üleminekud pole kiirguslikud, energia antakse vahetult kristallivõrele, mistõttu kristall soojeneb. Ergastatud olek 2 on aga metastabiilne, üleminek $2 \rightarrow 1$ on keelatud valikureeglitega (eluiga $\sim 10^{-3}$ s). Seetõttu on impulsi lõpuks kroomiaatomite arv tasemel E_2 (olekus 2) suurem kui tasemel E_1 . Teisiti - tasemete E_2 ja E_1 vahel on pöördhõive. Laser on tööks valmis.

Laseri töötav keha on vardakujuline, varda otspinnad on lihvitud hästi tasasteks ja omavahel paralleelseteks. Üks otspind on peegel, teine poolläbilaskev peegel.

Laseri kiirgusimpulssi alustab footon, mis tekib spontaansel üleminekul $2 \rightarrow 1$. Sellised üleminekud on vähe tõenäoselised, kuid mõningad siiski toimuvad. Nendel üleminekutel tekkinud footonid tekitavad omakorda indutseeritud kiirguse, indutseeritud kiirgusel tekkinud footonid kutsuvad esile järjest uusi indutseeritud footoneid. Protsess kulgeb järjest kasvava laviinina. Meenutame, et indutseeritud kiirgusel tekkinud footonid levivad samas suunas neid esilekutsunud footonitega ja on viimastega koherentsed. Spontaansel kiirgusel tekkinud footonid, mille suund ei ühti varda teljega, suurt laviini ei tekita, nad väljuvad kiiresti varda külgpinnalt. Laviini tekitavad footonid, mille suund ühtib varda teljega (on sellega paralleelne). Pärast paljukordset peegeldumist realiseeruvad lõpuks praktiliselt kõik metastabiilsed olekud ja poolläbilaskvast peeglist väljuvad praktiliselt kõik footonid, sest neeldumine laseri aines on väike.

Kirjeldasime impulsslaserit. Laser võib töötada ka pidevas režiimis. Rubiinlaseris kasutatakse optilist ergastust - metastabiilseid olekuid tekitatakse valguse abil.

Gaaslaserites (kasutatakse He ja Ne segu) toimub ergastamine gaaslahendusel - heeliumiaatomite mitteelastsetel põrgetel elektronidega, pooljuhtlaserites - elektrivoolu abil.

Laserkiirguse omadused: 1) suur ajaline ja ruumiline koherentsus, 2) range monokromaatsus, 3) suur võimsus, 4) kitsas paralleelne kiirtekimp.

K V A N T S T A T I S T I K A J A T A H K E K E H A F Ü Ü S I K A

KVANTSTATISTIKA

Mandunud ja mittemandunud kollektiivid

Käitumise järgi kollektiivis võib kõik mikroosakesed jaotada kahte rühma: fermionid ja bosonid.

Kollektiivis ilmutavad fermionid püüdu "eraldumisele" - kui antud kvantolek on ühe fermioni poolt täidetud, siis teine samasugune fermion sinna enam minna ei saa (Pauli printsiip). Bosonid seevastu püüavad "ühineda" - nad võivad piiramatult asustada üht ja sama olekut ja teevad seda seda "meelsamini", mida rohkem neid seal juba on.

Vaatame lähemalt osakeste omaduste mõju kollektiivi kui terviku omadustele. Et see mõju ilmneks, on vaja, et osakesed "kohtuksid" üksteisega küllalt sageli. "Kohtumise" all mõistame siin mitme osakese sattumist samasse olekusse või lähedastesse olekutesse. Koosnegu süsteem N ühesugusest osakesest, mis võivad olla G erinevas olekus. "Kohtumise" sageduse mõõduks on sel juhul suhe N/G . Kui

$$\frac{N}{G} \approx 1, \quad (597)$$

siis on küsimus sellest, kuidas osakesed täidavad olekuid - kas ühekaupa või kollektiivselt - väga oluline. Sel juhul ilmneb osakeste spetsiifika täiel määral. See spetsiifika avaldab märgatavat mõju kollektiivi kui terviku käitumisele. Niisuguseid kollektiive nimetatakse mandunuteks. (597) on

mandumise tingimus.

Kui

$$\frac{N}{G} \ll 1 \quad \text{ehk} \quad G \gg N, \quad (598)$$

siis on vakantsete, täitmata olekute arv suur. Sel juhul fermionide ja bosonite spetsiifika ei ilmne, iga osakese "käsutuses" on suur hulk vabu olekuid ja küsimust ühe oleku täitmisest mitme osakese poolt praktiliselt ei teki. Seetõttu kollektiivi kui terviku omadused osakeste spetsiifika ei olene. Niisuguseid kollektiive nimetatakse mittemandunuteks. (598) on mittemandumise tingimus.

Klassikaline ja kvantstatistika

Mandunud kollektiiv võib moodustuda ainult kvantmehaanilistest objektidest, kuna ainult nende parameetrid võivad muutuda diskreetselt, tänu millele olekute arv G on lõplik. Klassikaliste objektide parameetrid võivad muutuda pidevalt ja olekute arv G on seetõttu lõpmata suur. Seega klassikalised osakesed võivad moodustada ainult mittemandunud kollektiive.

Kvantmehaanilised osakesed võivad aga moodustada nii mandunud kui mittemandunud kollektiive.

Statistikat, mis uurib mittemandunud kollektiive, nimetatakse klassikaliseks e. Maxwell-Boltzmanni statistikaks.

Statistikat, mis uurib mandunud kollektiive, nimetatakse kvantstatistikaks. See omakorda jaguneb:

Fermi-Diraci statistika - uurib fermione;

Bose-Einsteini statistika - uurib bosoneid.

Jaotusfunktsioonid

Osakeste jaotuse energiatega järgi määrab nn. täielik statistiline jaotusfunktsioon $N(E)$. Tema sisu: $N(E)dE$ määrab osakeste arvu, mille energiad asuvad vahemikus $E \dots E + dE$. Järelikult $N(E)$ annab osakeste arvu ühikulises energiavahemikus antud E läheduses.

$N(E)$ antakse kahe funktsiooni korrutisena:

$$N(E) = f(E)g(E). \quad (599)$$

Jaotusfunktsioon $f(E)$ määrab osakeste arvu antud olekus (olekus energiaga E).

$g(E)dE$ annab olekute arvu energiavahemikus $E \dots E+dE$.

Olekute tihedus $g(E)$ määrab olekute arvu ühikulises energiavahemikus antud E läheduses. Järelikult ta kirjeldab olekute jaotust energiatega järgi.

Faasiruum

Klassikalises mehaanikas on osakese olek määratud kolme koordinaadiga x, y, z ja impulsi kolme komponendiga p_x, p_y, p_z . Kujutame ette 6-mõõtmelist ruumi koordinaattelgedega x, y, z, p_x, p_y, p_z . Osakese olek niisuguses ruumis on igal ajahetkel määratud punktiga, mille koordinaadid on x, y, z, p_x, p_y, p_z . Sellist ruumi nimetamegi faasiruumiks.

Suurust

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_V \Delta\Gamma_p = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \quad (600)$$

nimetatakse faasiruumi elemendiks.

$$\Delta\Gamma_V = \Delta x \Delta y \Delta z \quad (601)$$

on tavalise ruumi element.

$$\Delta\Gamma_p = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \quad (602)$$

on impulsside ruumi element.

Kuna klassikalise osakese koordinaadid ja impulsi komponendid võivad muutuda pidevalt, siis elemendid $\Delta\Gamma_V$ ja $\Delta\Gamma_p$ võivad olla kui tahes väikesed.

Teisiti on asi, kui osakeseks on elektron või mõni teine mikroosake. Kooskõlas määramatuse relatsiooniga ($\Delta x \Delta p_x \geq h$) on võimatu eristada kahte olekut x, y, z, p_x, p_y, p_z ja $x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, p_x + \Delta p_x, p_y + \Delta p_y, p_z + \Delta p_z$, kui korrutis $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z < h^3$. Kuna see korrutis on faasiruumi element, siis järeldub siit, et erinevatele faasiruumi elementidele vastavad erinevad mikroosakese kvantolekud

ainult siis, kui nende elementide suurus on vähemalt h^3 .

Seetõttu kvantstatistikas loetakse 6-mõõtmelise faasiruumi elementaarrakuks faasiruumi elementi

$$\Delta\Gamma = \Delta\Gamma_V \Delta\Gamma_p = h^3. \quad (603)$$

Vabad osakesed

Vabad osakesed on osakesed, mille vahel puudub vastasmõju ja mis ei asu välises väljas. Nende potentsiaalne energia on 0.

Niisuguste osakeste jaoks on mugavam kasutada mitte 6-mõõtmelist faasiruumi, vaid 3-mõõtmelist impulsiruumi. Sel juhul on ruumielement $\Delta\Gamma_V$ lihtsalt kogu ruum V , milles osakesed liiguvad, kuna mingeid kitsendusi nende asukoha jaoks pole.

$$\Delta\Gamma_V = V. \quad (604)$$

Seega vabade mikroosakeste jaoks 3-mõõtmelise impulsiruumi elementaarrakk

$$\Delta\Gamma_p = \frac{h^3}{V}. \quad (605)$$

Igale niisugusele elementaarrakule vastab kvantolek, mis erineb teistest olekutest.

Faasiruumi jaotamist lõpliku suurusega rakkudeks (h^3 või h^3/V) nimetatakse faasiruumi kvantimiseks.

Vabade osakeste olekute tihedus

Leiame olekute tiheduse $g(E)$ vabade mikroosakeste jaoks. Selleks kujutame impulsiruumis kahte kera raadiustega p ja $p + dp$. Nende kahe kera vahel asub kerakiht ruumalaga $4\pi p^2 dp$. Elementaarrakkude arv selles kihis: $\frac{4\pi p^2 dp}{\Delta\Gamma_p} =$
 $= \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp.$

Kuna igale elementaarrakule vastab üks olek, siis on see ühtlasi olekute arv vahemiku dp kohta.

$$g(p)dp = \frac{4\pi V}{h^3} p^2 dp. \quad (606)$$

Saime jaotuse impulsside järgi. Minnes üle jaotusele energia-
te järgi ($E = \frac{p^2}{2m}$; tuleb silmas pidada, et võrdsed pole mit-
te $g(p)$ ja $g(E)$, vaid $g(p)dp = g(E)dE$), saame:

$$g(E)dE = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} dE. \quad (607)$$

$$g(E) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (608)$$

Avaldised (607), (608) kehtivad mittelativistlike osakes-
te jaoks.

Näeme, et olekute tihedus on võrdeline järgmiste suu-
rustega: \sqrt{E} (E - vaba osakese kineetiline energia); $m^{3/2}$
(m - osakese mass); V .

Spinniga osakeste korral vastab igale elementaarrakule
niimitu olekut, kui mitu spinni erinevat orientatsiooni on
võimalik (spinn-olekud). Elektronide ja footonite korral ole-
kute arv kahekordistub.

$$g(p) = \frac{8\pi V}{h^3} p^2. \quad (609)$$

$$g(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E}. \quad (610)$$

Viimane avaldis kehtib jälle mitterealistlike osakeste jaoks
(footonite jaoks mitte).

Olekute tihedus ei olene sellest, kas tegemist on
fermionide või bosonitega, mandunud või mittemandunud oleku-
tega. Sellest oleneb olekute realiseerumine.

BOSE-EINSTEINI STATISTIKA. TAHKE KEHA
SOOJUSMAHTUVUS

Bose-Einsteini jaotusfunktsioon

Bose-Einsteini jaotusfunktsioon on bosonite jaotusfunktsioon energiatega järgi. Meenutame, et jaotusfunktsioon annab osakeste arvu olekus energiaga E . Bosonite jaoks Pauli printsiip ei kehti, nad võivad täita nii vabu olekuid kui ka olekuid, mis on juba täidetud teiste bosonite poolt, seejuures seda "meelsamini", mida rohkem neid selles olekus juba on. Bose-Einsteini jaotusfunktsioon mandunud bosongaasi jaoks

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1} \quad (611)$$

Footongaas

Mandunud bosongaasi näiteks võib olla footongaas. Kujutame ette avaust absoluutselt mustas kehas, mille temperatuur T on konstantne. Niisugune avaus on täidetud tasakaalse soojuskiirgusega. Kvantseisukohalt võib seda kiirgust vaadata kui tohutu arvu footonite kogumit - see ongi footongaas. Footoni spinn on 1 ($s=1$). Seega footon on boson. Võrreldes teiste bosonitega (näit. He_2^4 tuumadega) on footonitel rida iseärasusi.

1. Nende seisumass on 0.
2. Kõik footonid liiguvad ühesuguse kiirusega c , kuid nende energia ja impulss võivad olla erinevad ($E = \hbar\omega$; $p = \frac{\hbar\omega}{c}$; $E = pc$).

3. Footonid ei põrku omavahel, nende vahel puudub vastasmõju. Seetõttu kehtib nende jaoks vabade osakeste olekute tihedus. Tasakaalne jaotus võib aga footongaasis kujuneda keha olemasolu korral, mis on võimeline kiirgama ja neelama footoneid (niisuguseks kehaks on meie näites avause seinad). Pideva kiirguse ja neeldumise käigus muunduvad ühe sagedusega footonid teistsuguse sagedusega footoniteks, kuid tasakaalu

korral jääb jaotus energiatega järgi ühesuguseks.

Kuna footoni energia $E = \hbar\omega$, siis

$$f_B(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (612)$$

Meenutame, et kogu statistiline jaotusfunktsioon (osakeste arv ühikulises energiavahemikus) $N(E) = f(E)g(E)$. Analogselt $N(\omega) = f(\omega)g(\omega)$ annab footonite arvu ühikulises sageduste vahemikus. Kiirgusenergia ruumtihedus ühikulise sageduste vahemiku kohta antud ω läheduses

$$\rho(\omega, T) = \frac{\omega \hbar N(\omega)}{V} \quad (613)$$

Minnes valemis (609) üle jaotusele ω järgi ($p = \frac{\hbar\omega}{c}$; ikka tuleb silmas pidada, et võrdseid on $g(p)dp$ ja $g(\omega)d\omega$), võib üsna lihtsalt saada $\rho(\omega, T)$ avaldise, mis ühtib avaldisega (592).

Kristallivõre normaalvõnkumised

Soojusliikumine tahketes kehaes (kristallides) on aatomite võnkumine tasakaaluasendi - kristallivõre sõlmpunkti ümber. Selle tõttu, et aatomid on kristallis omavahel tugevasti seotud, osutub nende võnkumiste täpne kirjeldamine küllalt keerukaks. Seepärast kasutatakse mitmesuguseid lähismeetodeid ja lihtsustusi.

Selle asemel, et kirjeldada iga aatomi võnkumist, vaadatakse nende kollektiivset liikumist ruumiliselt korrapärasel süsteemis. Kuna aatomid on omavahel tugevasti seotud, kandub ühe aatomi võnkumine kohe naaberaatomitele - tekib elastne laine, mis haarab terve kristalli. Niisugust aatomite kollektiivset võnkumist nimetatakse võre normaalvõnkumiseks. Normaalvõnkumiste arv, mis võres võib tekkida, võrdub kõigi aatomite vabadusastmete arvuga $3N$ (N on aatomite arv).

Vaatleme esmalt tahke keha ühemõõtmelist mudelit - lineaarset aatomite ahelat, milles aatomid asuvad ühesugusel kaugusel a (a on võrekonstant). Niisuguses ahelas võivad levida kolme liiki e. kolme erineva polarisatsiooniga lained: üks pikilaine ja kaks ristlainet vastastikku ristuvates sih-

tides toimuvate võnkumistega. Järgnevas arutluses vaatame ainult ühte ristlainet. Kui niisuguse ahela otsad on kinnitatud, siis võib ahelat vaadata keelena, milles tekivad seisvad lained. Niisugune mudel vastab küllalt hästi reaalsusele, sest kui kristallis hakkavad aatomid võnkuma, siis kannuvad need võnkumised edasi elastse lainena. Kristalli serval laine peegeldub. Otselaine ja peegeldunud laine liitumisel tekibki seisev laine. Kõige madalam nn. põhisagedus ω_{\min} vastab seisvale lainele, mille sõlmed on ahela otstes. Järgmise kõrgema sageduse (teise harmoonilise) annab seisev laine sõlmedega ahela otstes ja keskel. Kolmanda harmoonilise annab seisev laine, mille sõlmed jaotavad ahela kolmeks võrdseks osaks jne. Ilmselt kõige väiksem lainepikkus, mis niisuguses ahelas võib tekkida, vastab kahekordsele aatomitevahelisele kaugusele. Väiksema lainepikkusega laine ei oma füüsikalist mõtet.

$$\lambda_{\min} = 2a. \quad (614)$$

Sellele vastab maksimaalne ringsagedus

$$\omega_{\max} = 2\pi\nu_{\max} = \frac{2\pi v}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi v}{a}, \quad (615)$$

kus v on lainete faasikiirus.

Vaadeldud normaalvõnkumised tekivad ühte liiki aatomitest koosnevas aines lihtsamate võrede korral. Neid nimetatakse akustilisteks võnkumisteks, sest võnkesagedused vastavad häälelainete võnkesagedustele.

Eri liiki aatomitest koosnevas aines või ka ühte liiki aatomite korral keerukas võres võivad lisaks akustilistele võnkumistele tekkida keerukamad, nn. optilised võnkumised. Need etendavad olulist osa valguse ja aine vastasmõjul. Meie piirdume akustiliste võnkumistega.

Kristallivõre normaalvõnkumiste spekter

Vaatleme normaalvõnkumiste jaotust sageduste järgi, teisiti öeldes - püüame leida nende võnkumiste olekute tihedust $g(\omega)$.

Lähtume jällegi lineaarsest aatomite ahelast. Ahelasse

pikkusega L mahub seisvate lainete korral ainult täisarv poollaineid:

$$L = z \frac{\lambda}{2}, \quad (616)$$

kust

$$\lambda_z = \frac{2L}{z} \quad (z=1, 2, \dots, N_1), \quad (617)$$

kus N_1 on aatomite arv ahelas;

z - normaalvõnkumiste arv, mille lainepikkus on võrdne või suurem λ_z -st.

$$z = \frac{2L}{\lambda_z}. \quad (618)$$

z_{\max} vastab minimaalsele lainepikkusele ($\lambda_{\min} = 2a$):

$$z_{\max} = \frac{L}{a} = N_1. \quad (619)$$

Läheme üle 3-mõõtmelisele kristallile. Lihtsuse mõttes vaatame kuubikujulist kristalli serva pikkusega L ($V=L^3$). Niisuguses kuubis tekkivate normaalvõnkumiste arv on z^3 . Arvestades aga, et ühesuguse lainepikkusega võib tekkida 3 erinevat normaalvõnkumist (3 erinevat polarisatsiooni), siis $3z^3$.

Seega kristallis tekkivate normaalvõnkumiste arv

$$Z = 3z^3 = 3\left(\frac{2L}{\lambda_z}\right)^3 = \frac{24V}{\lambda_z^3}. \quad (620)$$

Veendume eelneva seose õigsuses. Normaalvõnkumiste maksimaalne arv peab võrduma kristalli aatomite vabadusastmete arvuga $3N = 3N_1^3$.

$$Z_{\max} = 3N = 3\left(\frac{L}{a}\right)^3 = 3N_1^3 = 3z_{\max}^3. \quad (621)$$

Läheme valemis (620) üle ringsagedustele ($\lambda_z = \frac{2\pi v}{\omega}$):

$$Z = \frac{24V}{8\pi^3 v^3} \omega^3 = \frac{3V}{\pi^3 v^3} \omega^3. \quad (622)$$

Täpsem tulekus (analoogne $g(\omega)$ tuletamisega vabade osakeste jaoks; vaadeldakse lainevektorite faasiruumi) annab kordaja $\frac{3}{\pi^3}$ asemel $\frac{1}{2\pi^2}$.

$$Z = \frac{V}{2\pi^2 v^3} \omega^3. \quad (623)$$

Selle funktsiooni diferentsiaal dZ annab nende võnkumiste arvu, mille sagedused asuvad vahemikus $\omega \dots \omega + d\omega$, see aga on teisest küljest $g(\omega)d\omega$. Seega

$$dZ = g(\omega)d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega. \quad (624)$$

$g(\omega)$ on võnkumiste arv ühikulises sageduste vahemikus

$$g(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2. \quad (625)$$

Kuna võnkumiste koguarv, mis kristallis võib tekkida, on $3N$, siis

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega)d\omega = 3N, \quad (626)$$

kust $\frac{V\omega_{\max}^3}{2\pi^2 v^3} = 3N$ ning viimasest

$$\omega_{\max} = v \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}}. \quad (627)$$

Temperatuuri Θ , mis on määratud tingimusest $\Theta k = \hbar\omega_{\max}$

(k - Boltzmanni konstant), nimetatakse Debye temperatuuriks:

$$\Theta = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k}. \quad (628)$$

Debye temperatuuril ergastatakse tahkes kehas kogu normaalvõnkumiste spekter. Seetõttu edasine temperatuuri tõstmine ei kutsu esile uusi võnkumisi, tõuseb vaid võnkumiste ergastatuse aste, mis viib ühe võnkumise keskmise energia kasvule. Temperatuure $T > \Theta$ loetakse kõrgeteks.

Avaldame valemist (627) v ja paigutame valemisse (625).

Saame:

$$g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_{\max}^3}. \quad (629)$$

Foononid

Iga normaalvõnkumine omab energiat ja impulssi.

Võnkumiste teoorias tõestatakse, et võre ühe normaalvõnkumise energia võrdub niisuguse ostillaatori energiaga, mille mass võrdub aatomi massiga ja mis võngub sagedusega, mis võrdub normaalvõnkumise sagedusega. Niisugust ostillaatorit nimetatakse normaalseks ostillaatoriks.

Tuleb rõhutada, et normaalsed ostillaatorid ei oma midagi ühist reaalsete aatomitega peale ühise massi. Tegelikult iga ostillaator kujutab endast ühte kogu kristallivõre normaalvõnkumistest, millest võtavad osa kõik aatomid, võnkudes ühesuguse sagedusega ω .

Olgu i -nda normaalvõnkumise energia E_i . Kogu kristallivõre energia, milles on ergastatud kõik $3N$ normaalvõnkumist:

$$E = \sum_{i=1}^{3N} E_i. \quad (630)$$

E_i on samal ajal ühe normaalse ostillaatori energia. Seega N seotud aatomist koosneva süsteemi keskmise energia leidmine taandub normaalsete ostillaatorite energia leidmisele.

Meenutame, et kvantmehaanilise ostillaatori energia

$$E_{in} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_i \quad (n=0,1,2, \dots). \quad (631)$$

Seega minimaalne energia, mida kristallivõre soojusvõnkumistel võib neelata või ära anda, on $\hbar\omega_i$.

$$\epsilon_f = \hbar\omega_i. \quad (632)$$

Seda kristallivõre soojusvõnkumiste energia kvanti nimetataksegi foononiks. Kristallivõre soojusvõnkumistel tekkivaid elastseid laineid võime vaadata kui gaasi, mille moodustavad

võre normaalvõnkumiste kvandid - foononid. Foononi impulss avaldub analoogselt footoni impulsi:

$$p_f = \frac{\hbar \omega_i}{v} = \frac{h}{\lambda_i} = \hbar q_i, \quad (633)$$

kus

$$q_i = \frac{2\pi}{\lambda_i} \quad (q_i \text{ on lainearv}).$$

Ülaltoodud kujutlustest lähtudes võib kristalli vaadelda kui foonongaasiga täidetud kasti. Foonon kujutab endast nn. kvaasiosakest. Kvaasiosakeste peamine erinevus tavalistest osakestest seisneb selles, et nad ei saa eksisteerida vaakumis, nende tekkeks ja eksisteerimiseks on vajalik keskkond. Foononid on bosonid (nende spinn on null). Järelikult alluvad nad Bose-Einsteini jaotusfunktsioonile:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_f}{kT}} - 1} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}, \quad (634)$$

kus $f(\varepsilon)$ on foononite arv, mille energia on ε_f .

Sõltuvalt antud normaalse ostsillaatori ergastatuse astmest võib ta väljastada teatava arvu foononeid. Kui ostsillaator on ergastatud näiteks kolmanda tasemeni, siis tema energia $E_3 = (3 + \frac{1}{2})\hbar$. See tähendab, et seda võnkumist võib vaadata kui foonongaasi, mis koosneb kolmest foononist energiaga $\hbar\omega$ igauks (energiat $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ta väljastada ei saa).

Valemist (634) järeldub, et antud temperatuuril T on võres ergastatud kõik normaalvõnkumised kuni energiani $\hbar\omega \approx kT$. Suurema sagedusega võnkumisi, mille $\hbar\omega > kT$, praktiliselt ei teki.

Kuna $f(\varepsilon)$ on nende foononite keskmine arv, mille sagedus on ω , siis niisuguse ergastatud normaalvõnkumise keskmine energia, mille sagedus on ω , on järgmine:

$$\bar{E} = \hbar\omega f(\varepsilon) = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (635)$$

Tahke keha siseenergia

Tahke keha siseenergiat võib vaadelda kui võre normaalvõnkumiste energiatega summat. Normaalvõnkumiste arv sageduste vahemikus $d\omega$ on $g(\omega)d\omega$. Korrutades selle ühe normaalvõnkumise keskmise energiaga \bar{E} , saame normaalvõnkumiste summaarse energia sageduste vahemikus $d\omega$:

$$dU = \bar{E}g(\omega)d\omega. \quad (636)$$

Integreerides viimast üle kogu võimaliku sageduste vahemiku $0 \dots \omega_{\max}$, saame tahke keha siseenergia:

$$U = \int_0^{\omega_{\max}} \bar{E}g(\omega)d\omega. \quad (637)$$

Paigutame viimasesse $g(\omega)$ valemist (629) ja \bar{E} valemist (635). Saame:

$$U = \frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega. \quad (638)$$

Teostades muutujate vahetuse $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$ ning arvestades, et $\omega_{\max} = \frac{k\theta}{\hbar}$ (628), saame:

$$U = 9Nk\theta \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 \int_0^{\theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (639)$$

Viimastes avaldistes on arvestamata see energia $\frac{\hbar\omega}{2}$, mida ostsillaator ära anda ei saa.

Tahke keha moolsoojus

Tahke keha moolsoojus

$$C = C_V = \frac{dU_m}{dT}, \quad (640)$$

kus U_m on ühe mooli siseenergia. Soojusmahtuvuse teoorias on peamiseks probleemiks C_V sõltuvus temperatuurist.

Vaatame eraldi madalaid ja kõrgeid temperatuure.

1. Madalad temperatuurid. $T \ll \theta$.

Sel juhul $\theta/T \rightarrow \infty$ ning integraal avaldises (639)

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}.$$

Ühe mooli siseenergia

$$U_m = \frac{3\pi^4}{5} N_A k \theta \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 = \frac{3\pi^4}{5} R \theta \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 \sim T^4, \quad (641)$$

kus N_A on Avogadro arv;

R - gaaside universaalkonstant.

Moolsoojus

$$C_V = \frac{dU_m}{dT} = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \sim T^3. \quad (642)$$

Viimane avaldis kujutab endast Debye seadust: madalatel temperatuuridel on tahkete kehade moolsoojus $C_V \sim T^3$.

Seega madalatel temperatuuridel kasvab tahkete kehade siseenergia võrdeliselt temperatuuri neljanda astmega. See kasv on põhjustatud järgmistest asjaoludest:

1) kasvab iga normaalvõnkumise ergastatuse aste ja koos sellega antud võnkumise keskmine energia; see kasv on võrdeline temperatuuriga (esimese astmega);

2) temperatuuri tõusuga ergastatakse järjest uuri normaalvõnkumisi, kasvab normaalvõnkumiste arv; see kasv on võrdeline temperatuuri kuubiga.

2. Kõrged temperatuurid. $T \gg \theta$.

Integraali arvutamisel avaldises (639) võime arvestada, et $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$ on väike ja e^x võime arendada ritta $e^x =$

$= 1 + x + \dots$ ning piirduda reaksarenduse esimeste liikmetega. (639) saab kuju:

$$U_m = 9R \theta \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 \int_0^{\theta/T} x^2 dx = 9R \theta \left(\frac{T}{\theta}\right)^4 \frac{1}{3} \left(\frac{\theta}{T}\right)^3,$$

kust

$$U_m = 3RT \sim T \quad (643)$$

ning

$$C_v = \frac{dU_m}{dT} = 3R = \text{const.} \quad (644)$$

Viimane on meile tuntud Dulong-Petit' seadus.

Selles piirkonnas on kõik normaalvõnkumised ergastatud. Siseenergia kasvab ainult ergastatuse astme kasvu tõttu.

Nende kahe piirkonna vahel on küllalt lai piirkond, kus toimub üleminek Debye seadusest Dulong-Petit' seadusele. Vaadeldav teooria käib mittemetalliliste tahkete kehade kohta.

Saadud tulemused on küllalt heas kooskõlas katsetega lihtsa võrega kristallide jaoks. Kuid sellise juhuga me piirduksimegi - vaatasime ainult akustilisi võnkumisi.

Ülivoolavus

Ülivoolavuse nähtus seisneb selles, et väga madalatel temperatuuridel (alla 2,18 K) vedelal heeliumil (He_2^4) praktiliselt puudub täielikult sisehõõrdumine, ta läbib peeni kapillaare ja pilusid ilma igasuguse takistusega. Nähtus esineb ainult heeliumil, kuna ainult heelium jääb nii madalatel temperatuuridel vedelasse olekusse.

Oluline ülivoolavuse seletamisel on see, et He_2^4 aatom on boson. Aatom koosneb kahest elektronist, kahest prootonist ja kahest neutronist, nende summaarne spinn on 0. He_2^3 -] ülivoolavus puudub, kuna tema aatom on fermion.

Ülivoolavus on puht-kvantmehaaniline efekt. Nii madalatel temperatuuridel on liikumise korrapäratus sedavõrd väike, et kvantmehaanilised efektid võivad ilmnedas makroskoopilistes ruumalades.

Sisehõõrdumine vedelikes on üldse seletatav sellega, et aatomitel on kiirused mitte ainult voolu suunas (soojust liikumine). Madalatel temperatuuridel võib probleemi käsitleda nii, et aatomite põhiolekuks on voolusuunaline liikumine. Liikumist

teistes suundades võib vaadata kui mikrohäiritust, sest soojusliikumise intensiivsus on väga väike. Seega madalatel temperatuuridel on enamik aatomeid põhiolekus - minimaalse energiaga olekus, üksikud aatomid aga mitte. Väga madalal temperatuuril püüavad kõik aatomid minna ühte olekusse - põhiolekusse. Häiritus kaob. See on võimalik ainult bosonite korral. Seega on ülivoolavuse nähtus tingitud vastastikusel mõjutes olevate bosonite kollektiivsetest omadustest. Kogu vedelik käitub kui ühtne kvantmehaaniline süsteem.

Kõrgetel temperatuuridel on see võimatu, sest soojusliikumise energia on piisav, et viia aatomeid kõikvõimalikesse kõrgema energiaga olekutesse.

FERMI-DIRACI STATISTIKA. METALLID JA POOLJUHI

Aatomitevaheliste sidemete tüübid tahketes keha

Tahked kehad on kristallid. Jõud, mis hoiavad aatomeid kristallis koos, sõltuvad sellest, millised aatomid kristalliks ühinevad. Konkreetne kristallivõre tüüp antud aine jaoks on määratud energia miinimumi printsiibiga - aatomid paiknevad kristallivõres nii, et süsteemi energia oleks minimaalne. Piirdume atomaarsete kristallidega. Eristatakse kolme põhilist sidemete tüüpi, seejuures kaks neist on samad, mis hoiavad aatomeid molekulis koos.

1. Ioonne side. Side teostub eri liiki aatomite vahel, kusjuures üht liiki aatomitel on väliskattel mõni elektron, teist liiki aatomitel on väliskatte (või allkatte) täitumisest sama palju elektrone puudu. Sel juhul annavad esimesed oma valentselektronid kergesti ära, teised aga võtavad need "meelsasti" juurde. Pärast niisugust elektronide ümberjaotamist muutuvad aatomid erimärgilisteks ioonideks, mida kristallis hoiavad koos elektrilised tõmbejõud. Tüüpiliselt moodustuvad ioonsed kristallid leelismetallide ja halogeenide aatomitest. Side on tugev. Näiteks NaCl korral on seoseenergia (energia, mis vabaneb kristalli moodustumisel) 7,9 eV molekuli kohta.

2. Kovalentne e. homöopolaarne side. Kristallivõre sõlm-

punktides on neutraalsed aatomid. Seejuures väliskatte elektronid (valentselektronid) kuuluvad samaaegselt mitmele aatomile (elektronpilved kattuvad osaliselt). Side teostub aatomite vahel paariviisi, sideme tekkimisel kahe aatomi vahel võtab sellest osa üks elektron kummastki aatomist. Seejuures nende sidemeelektronide spinnid on vastassuunalised (sel juhul tekivad tõmbejõud). Seega aatomite paaridel on ühised elektronpaarid. Kuna iga valentselektron võib kindlustada sideme ühe aatomiga, siis sidemete arv, millest võib osa võtte üks aatom, võrdub tema valentsiga (valentselektronide arvuga). Side on tüüpiline neljavalentsetele elementidele. Side on tugev - seoseenergia on ligikaudu 10 eV aatomi kohta.

3. Metalliline side. Võre sõlmpunktides on positiivsed ioonid. Valentselektronid (vabad elektronid) kuuluvad samaaegselt kõigile aatomitele. Elektrongaas jaotub ühtlaselt kogu kristallis. See negatiivne gaas "tsementeerib" positiivsed ioonid. Side pole tugev. Näiteks Na korral on seoseenergia 1,1 eV aatomi kohta.

Paljudes kristallides esineb koos metallilise sidemega kovalentne side. Neis on side tugev: näiteks W korral on seoseenergia 9 eV aatomi kohta.

Energia tsoonid kristallides

Klassikalises metallide teoorias loeti iseenesestmõistetavaks, et vabadel elektronidel võib olla mis tahes energia ja see võib muutuda pidevalt. Kvantteooria järgi on elektroni energia ka kristallides kvanditud. Seejuures lubatud energia tasemed grupeeruvad nn. tsoonideks.

Et mõista tsoonide teket, vaatame vabade (isoleeritud) aatomite ühinemist kristalliks. Isoleeritud aatomitel võivad elektronid olla vaid kindlates energeetilistes seisundites. Kui meil on N ühesugust aatomit, siis nende energiatasemed on täpselt ühesugused. Järelikult võib sellise süsteemi olekut vaadata kōdunenuna - on olemas N ühesuguse energiaga olekut. Aatomite lähenemisel üksteisele tekib nende vahel vastasmõju, tekib lisaenergia, häiritus, mis viib energiatasemete nihkumisele ja jagunemisele. Jällegi toimib kvantmehaanika üks põhiprintsiipi - häiritus kaotab kōdunemise. Iga üksiku

aatomi energiataseme asemel tekib N väga lähedast, kuid mitte ühtelangevat taset. Need tasemed moodustavadki energia tsooni. Seega tsoon on energiatasemete kogum, mis tekib kristalli moodustumisel ühest isoleeritud aatomi energiatasemest.

Täpsemini saab energiliste tsoonide teket põhjendada, vaadates elektronide liikumist kristallivõre perioodilises väljas (perioodiliselt muutuva potentsiaaliga väljas).

Kõik tasemed ei jagune ühtlaselt. Sisekatetele vastavaid tasemeid häiritakse aatomite lähenemisel märksa vähem kui väliskatete tasemeid. Seepärast sisekatete tasemed jagunevad märksa vähem (või ei jagune üldse). Märgatavalt jagunevad vaid valentselektronidega täidetud tasemed, samuti kõrgemad tasemed, mis aatomi põhiolekus pole elektronidega täidetud.

Tsooni, mis tekib tasemest, millel paiknevad valentselektronid aatomi põhioleku korral, nimetatakse valentstsooniks.

Tsooni, mis tekib järgmisest, kõrgemast tasemest (mis aatomi põhiolekus on tühi), nimetatakse vabaks tsooniks.

Madalamad tasemed, mis ei jagune, täidetakse elektronidega, mis on tugevasti seotud antud aatomi tuumaga. Need meid edaspidi ei huvita. Järgnevas huvitab meid ainult valentstsoon ja vaba tsoon.

Kõik kristalli aatomid moodustavad ühtse kvantmehaanilise süsteemi. Pauli printsiip kehtib kristalli kohta tervikuna. Pauli printsiip tsoonide tasemete kohta: ühel tsooni tasemel võib olla vaid kaks elektroni vastassuunaliste spinidega.

Lubatud energeetilised tsoonid on teineteisest eraldatud vahemikega, kus lubatud energia väärtusi pole. Neid vahemikke nimetatakse keelatud tsoonideks. Lubatud ja keelatud tsoonide laius sõltub ainult aatomitevahelisest kaugusest kristallis (mis konkreetse kristalli korral on kindel suurus), mitte aga kristalli mõõtmetest (aatomite arvust kristallis). Väikeste aatomivaheliste kauguste korral võib tekkida tsoonide osaline kattumine. Sellises kattunud tsoonis võrdub tasemete arv kummagi tsooni tasemete arvu summaga.

Tavaliselt on lubatud tsoonis laiuseks mõni eV. Kuna tasemete arv tsoonis võrdub kristalli moodustavate aatomite arvuga N , siis paiknevad tasemed tsoonis väga tihedalt. Näiteks kui $N = 10^{23}$, siis kaugus tasemete vahel on $\sim 10^{-23}$ eV.

Juhid, pooljuhid ja dielektrikud

Temperatuuril $T = 0$ peab kristalli energia olema minimaalne. Seetõttu sellel temperatuuril täidavad valentselektronid paariviisi kõik alumised tasemed valentstsoonis. Vaba tsoon on tühi.

Selleks et aine juhiks elektrit, peab valentselektronidel olema võimalus väikeste annustena energiat juurde saada (väljas kiirenedada), sest elektriväljalt võib elektron saada vaid väga vähe energiat. Teisiti: elektronidel peab olema võimalus tsoonis madalamatelt tasemetelt kõrgematele üle minna. See võimalus (või võimatus) määrabki ainete elektrijuhtivuse.

Sõltuvalt valentstsooni täituvusest ja keelutsooni laiusest on võimalik kolm erijuhtu.

1. Metallid. Eraldi tuleb veel vaadata ühevalentseid ja kahevalentseid metalle.

A. Ühevalentsed metallid. Valentstsoonis on N taset (N on ikka aatomite arv kristallis). Tsoonis "mahub" $2N$ elektroni. Valentselektrone on N , $T = 0$ juures täidavad nad paariviisi $N/2$ alumist taset, kõrgematel temperatuuridel on elektrone ka kõrgematel tasemetel. Pool tsoonist ($T = 0$ juures ülemine pool) on tühi ja elektronidel on võimalus elektrivälja mõjul kõrgematele tasemetele üle minna. Aine on hea elektrijuht. Valentstsoon muutub sel juhul juhtivustsooniks.

B. Kahevalentsed metallid (leelismuldmetallid). Valentstsoon on täielikult täidetud, kuid valentstsoon ja vaba tsoon kattuvad osaliselt. Seetõttu tekib elektronidel täiendav võimalus üleminekuks kõrgematele tasemetele. Aine juhib elektrit. Juhtivustsooniks on vaba tsoon.

2. Pooljuhid. $T = 0$ juures on valentstsoon täielikult täidetud, keelutsooni ületamiseks ja järgmisse - vabasse tsooni minekuks aga elektrivälja energiast ei piisa. Aine ei ju-

hi elektrit. Keelutsooni laius on väike ($E_g \approx 1$ eV). Soojusliikumise keskmine energia ($\frac{3}{2} kT$) 1 K kohta on $\sim 10^{-4}$ eV, toatemperatuurile vastab energia $\sim 0,03$ eV. Sellest piisab, et mõningaid elektrone valentstsoonist vabasse tsooni üleviia. Need mõningad üleläänud elektronid võivad seal välja mõjul üle minna kõrgematele tasemetele. Tekib väike juhtivus. Juhtivustsooniks on vaba tsoon. Samuti võivad elektronid valentstsoonis vabanenud kohtadele madalamatelt tasemetelt üle minna.

3. Dielektrikud. Energiadiagramm erineb pooljuhtide energiadiagrammist ainult keelutsooni laiuse poolest (mõni eV). Ka soojusliikumise energiast (tavalistel temperatuuridel) ei piisa elektronide üleviimiseks vabasse tsooni, valentstsoonis aga üleminekuid ei saa toimuda, kuna ta on täidetud. Aine ei juhi elektrit. Ülaltoodust järeldub ühtlasi, et vahe pooljuhtide ja dielektrikute vahel on tinglik.

Nagu näeme, seletab kvantmehaanika ühtsest seisukohast kõigi ainete elektrilisi omadusi.

Vabade elektronide jaotus metallis

Valentselektrone metallis võib suure täpsusega vaadelda vabade osakestena - seda loomulikult metalli sees (täpsemini - nad liiguvad võre perioodilises väljas). Järelikult kehtib nende jaoks vabade osakeste olekute tihedus (610) (olekute arv ühikulise energiavahemiku kohta):

$$g(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E}, \quad (645)$$

kus m on elektroni mass;

V - kristalli ruumala.

Metallis käitub elektrongaas kuni väga kõrgete temperatuurideni mandunud gaasina. Järelikult alluvad vabad elektronid metallis Fermi-Diraci statistikale. Fermi-Diraci jaotusfunktsioon (osakeste arv antud olekus):

$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}, \quad (646)$$

kus E_F on süsteemi iseloomustav parameeter, nn. Fermi energia e. Fermi tase.

Meenutame, et energiatasemele E vastab kaks olekut (spinni 2 orientatsiooni). Seega keskmine elektronide arv tasemel energiaga E võrdub $2f_E$.

Täielik statistiline jaotusfunktsioon (elektronide arv ühikulises energiavahemikus):

$$N(E) = f_F(E)g(E). \quad (647)$$

Vaatame esmalt elektronide jaotust $T = 0$ juures. Nagu eespool selgitasime, on ühevalentse metalli korral täidetud alumine pool valentstsoonist ($N/2$ alumist taset). (646) põhjal: kui $E < E_F$, siis $f_F(E) = 1$; kui $E > E_F$, siis $f_F(E) = 0$. Seega on $T = 0$ juures täidetud kõik tasemed energiaga $E < E_F$, tasemed energiaga $E > E_F$ on vabad. Funktsiooni $f_F(E)$ graafik $T = 0$ juures kujutab endast energiateljega paralleelset sirget ($f_F=1$), mis $E = E_F$ korral langeb hüppeliselt nullini.

Leiame E_F väärtuse. Kuna kõigi täidetud olekute jaotus $f_F = 1$, siis $N(E)=g(E)$.

Integraal

$$\int_0^{E_F} N(E)dE = \int_0^{E_F} g(E)dE = N, \quad (648)$$

s.t. annab vabade elektronide koguarvu.

$$\int_0^{E_F} g(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{3/2} \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} \frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{3/2} E_F^{3/2}.$$

Seega

$$N = \frac{8\pi V}{3h^3}(2m)^{3/2} E_F^{3/2}. \quad (649)$$

$\frac{N}{V} = n$ on vabade elektronide arv ruumalaühikus e. kontsent-

ratsioon. (649)-st:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (650)$$

Seega on Fermi energia määratud vabade elektronide kontsentratsiooniga. Metallides $n \approx 5 \cdot 10^{28} \frac{1}{m^3}$ ja $E_F \approx 5$ eV.

Teades elektronide jaotust energiatega järgi (olekute tihedust), võib määrata vaba elektroni keskmise energia. Sama: $E = \frac{3}{5} E_F \approx 3$ eV. $E \neq \frac{1}{2} E_F$, kuna tasemete tihedus kasvab E kasvades.

Energia nullnivooks võtsime integreerimisel valents-
tsooni põhja (kõige alumise taseme) energia. See on ühtlasi valents-
tsooni elektronide potentsiaalne energia. Seega vaadeldav energia on elektronide kulgliikumise kineetiline energia. See on puhtkvantmehaanilise iseloomuga energia, mis tekitab elektronide kui fermionide spetsiifiliste omaduste tõttu. See on väga suur energia. Et anda klassikalisele elektrongasile (kui üheaatomilisele gaasile) sellist energiat ($\frac{3}{2} kT$), peaks temperatuur olema $\sim 10^4$ K.

Vaatame, kuidas muutub elektronide jaotus energiatega järgi, kui $T \neq 0$. Kõigepealt: E_F sõltub temperatuurist nõrgalt, nii et esimeses lähenduses võime lugeda $E_F = \text{const}$ (tegelikult veidi väheneb temperatuuri tõusul). Temperatuuri tõustes hakkavad elektronid üle minema kõrgematele vabadele tasemetele. Kuid temperatuuridel, mille juures $kT \ll E_F$ ($T \ll \ll 10^4$ K) võivad kõrgematele tasemetele üle minna ainult väga vähesed elektronid - need, mis paiknevad E_F lähedastel tasemetel. Seetõttu muutub kõvera $f_F(E)$ kõik temperatuuri tõustes vähe, rõhuv osa elektrone jääb samadele tasemetele, kus nad olid $T = 0$ juures ($f_F = 1$), ainult hüpeline langus kõvera "saba" juures asendub sujuvamaga. Seejuures, mida kõrgem on temperatuur, seda lamedam on kõvera "saba". Rõhuv osa elektrone, mis asuvad sügavamatel tasemetel, ei saa üle minna vabadele tasemetele, kuna soojusliikumise energiast selleks lihtsalt ei piisa. Elektrongas jääb mandunud olekusse.

Kui $T \neq 0$, siis $E = E_F$ korral $f_F(E) = \frac{1}{2}$. Seega: kui $T \neq 0$, siis E_F on niisuguse taseme energia, mille täitumise tõenäosus on $\frac{1}{2}$, ajaliselts keskmiselt asub seal üks elektron.

Nüüd saab selgeks ka see, miks elektrongaas ei suurenda metalli soojusmahtuvust. Soojusliikumise keskmine energia tavalistel temperatuuridel $\frac{3}{2}kT \approx 0,03$ eV. Sellist energiat võivad juurde saada ainult Fermi taseme lähedastel tasemetel asuvad elektronid. Rõhuv osa elektrone jääb samasse olekusse kui $T = 0$ juures, energiat juurde võtta nad ei saa, kuna kõrgemal pole vabu tasemeid. Seega elektrongaas praktiliselt ei suurenda metalli soojusmahtuvust, elektrongaasi soojusmahtuvus on ligikaudu 0. Ainult väga madalatel temperatuuridel (kui võre soojusmahtuvus on samuti väike) annab elektrongaas arvestatava panuse metalli soojusmahtuvusesse.

Kõigil temperatuuridel, mille korral $kT \ll E_F$, jääb elektrongaas mandunud olekusse. Mandumine kaoks, kui $kT > E_F$, kuid sellistel temperatuuridel pole üksi metall enam kristall.

Temperatuuri, mida arvutatakse tingimustest $kT_F = E_F$, nimetatakse Fermi temperatuuriks:

$$T_F = \frac{E_F}{k}. \quad (651)$$

Metallide elektrijuhtivus

Klassikalises elektronteoorias saime metallide erijuhtivuse jaoks avaldise

$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{ne^2 \bar{\lambda}}{m\bar{v}}, \quad (652)$$

kus n on vabade elektronide kontsentratsioon;

$\bar{\lambda}$ - keskmine vaba tee, elektroni tee põrkest põrkeni ioniga;

\bar{v} - soojusliikumise keskmine kiirus.

Peaaegu analoogne tulemuskaik annab kvantmehaanikas

peaaegu sama avaldise (puudub ainult kordaja 1/2). Kuid suuruste tõlgendus on hoopis erinev.

Esmalt - nagu eespool nägime, ei saa juhtivusest osa võtta kaugeltki kõik valentstsooni elektronid, vaid ainult Fermi taseme lähedastel tasemetel olevad elektronid. Seetõttu tuleb n asemel võtta nende vabade elektronide kontsentratsioon n_F , mis asuvad Fermi taseme lähedastel tasemetel.

Just need elektronid on metallis voolukandjateks. Samal põhjusel tuleb soojusliikumise keskmise kiiruse \bar{v} asemel võtta v_F , mis on leitud tingimusest $\frac{mv_F^2}{2} = E_F$.

$$v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m}}. \quad (653)$$

Kuna E_F praktiliselt temperatuurist ei sõltu, siis ei sõltu ka v_F ($\bar{v} \sim \sqrt{T}$).

Edasi - elektronide põrgete asemel ioonidega tuleb vaadata elektronlainete hajutamist soojusvõnkumisi sooritavalt aatomitelt (ioonidelt) e. foononitelt. Iga aatom võngub tasakaaluasendi ümber, jäädes seejuures niisuguse kera piiridesse, mille raadius võrdub võnkeamplituudiga. Sellise kera ristlõige $S = \pi a^2$. Kui elektron satub sellisele kettale, siis muutub tema liikumise suund. Elektroni kettale sattumise tõenäosus on võrdeline ketta pindalaga, vaba tee pikkus aga sellega pöördvõrdeline: $\lambda \sim \frac{1}{a^2}$. Võnkumise energia $E \sim a^2$. Teisest

küljest - soojusvõnkumise energia kõrgetel temperatuuridel (esialgu vaatleme neid) $E \sim T$. Seega kõrgetel temperatuuridel $\lambda \sim \frac{1}{T}$. Ühtlasi on aatomite võnkumise intensiivsus kõrgetel temperatuuridel nii suur, et juba ühel hajutamisel kaotab elektron oma suunatud liikumise. Seega on λ elektroni teepikkus ühest hajutavast aatomist teiseni.

Lõpuks tuleb elektroni massi asemel võtta nn. efektiivne mass m_{ef} (sellest mõistest tuleb juttu hiljem). Tegelikult küll Fermi taseme lähedaste tasemete elektronide efektiivne mass metallis ei erine oluliselt elektroni tegelikust massist.

Seega

$$\sigma = \frac{n_f e^2 \lambda}{m_{ef} v_F}. \quad (654)$$

Kõrgetel temperatuuridel sõltub temperatuurist ainult λ , seetõttu $\sigma \sim \frac{1}{T}$ ning $\rho = \frac{1}{\sigma} \sim T$, mis on heas kooskõlas katsetega.

Peale võre soojusvõnkumiste hajutavad elektrone intensiivselt mitmesugused võre defektid ja lisandid (teist liiki aatomid võres). Seetõttu sõltub metalli takistus tugevasti tema puhtusest. Madalamatel temperatuuridel võre soojusvõnkumiste osatähtsus järjest väheneb ja otsustavat osa hakkab etendama just hajutamine lisanditelt. See aga enam temperatuurist ei sõltu ja seega ka takistus madalamatel temperatuuridel oluliselt temperatuurist ei sõltu.

Vaatleme metallide juhtivust veel veidi teisest aspektist. Erijuhtivuse avaldis laengute (voolukandjate) liikuvuse kaudu:

$$\sigma = en_F b, \quad (655)$$

kus b on voolukandjate liikuvus.

$$b = \frac{e\lambda}{mv_F}. \quad (656)$$

Seega on elektrijuhtivus määratud kahe faktoriga: voolukandjate kontsentratsioon ja liikuvusega. Metallis käitub elektrongaas kui mandunud gaas ja seetõttu voolukandjate kontsentratsioon oluliselt temperatuurist ei olene, temperatuurist oleneb just voolukandjate liikuvus.

Ülijuhtivus

Meenutame, et ülijuhtivuse nähtus seisneb selles, et mõningate metallide ning sulamite takistus temperatuuri absoluutse nulli läheduses langeb hüppeliselt ja muutub kaduvväikeseks. Temperatuuri, mille juures aine muutub ülijuhtivaks, nimetatakse kriitiliseks temperatuuriks. Erinevatel ainetel $T_k \approx 0,01 \dots 20$ K.

Ohmi seadusest (diferentsiaalvõrrand): $j = \sigma \mathcal{E}$ $j = \frac{1}{\rho} \mathcal{E}$;
 $\rho = \frac{\mathcal{E}}{j}$. Kui $\rho = 0$, siis väljatugevus $\mathcal{E} = 0$, s.t. vool on juhtmes olemas ka elektrivälja puudumisel. Kord tekitatud vool püsib kontuuris praktiliselt lõpmata kaua.

Ülijuhtivuse olekus kaob ka magnetväli ülijuhi sees. Väline väli ei suuda tungida ülijuhi sisse. Formaalselt võib öelda, et ülijuhi magnetiline läbitavus $\mu = 0$. Meenutame, et $\mu < 1$ diamagneetikutel. Seega ülijuht on ideaalne diamagneetik.

Küllalt tugeva välise magnetvälja abil võib ülijuhtivuse kaotada. Seda magnetilise induktsiooni minimaalset väärtust, mis kaotab ülijuhtivuse, nimetame kriitiliseks. $B_k = f(T)$; see funktsioon on monotoonselt kahanev funktsioon, ta muutub nulliks argumendi väärtusel $T = T_k$.

Samuti kaob ülijuhtivus teatava voolutugevuse (mida jälle nimetatakse kriitiliseks) I_k juures. Funktsiooni $I_k = f(T)$ käik on analoogne funktsiooni $B_k = f(T)$ käiguga.

Ülijuhtivus on teine nähtus (kõrvuti ülivoolavusega), mille korral kvantmehaanilised efektid ilmnevad makromastabis.

Ülijuhtivuse põhjendamisel on oluline osa seotud elektronide paaride, nn. Cooperi paaride moodustumisel. Selgitame nende tekkemehanismi. Vaba elektron, liikudes positiivsete ioonide ruumvõres, tõmbab neid enda poole, deformeerib ruumvõret, tekitades sellega oma teel positiivse laengu lokaalse ülejäägi, mis liigub koos elektroniga. Selle positiivse laengu poole tõmbub teine elektron. Seega lisaks kuulonilisele tõukejõule tekib elektronide vahel tõmbejõud. See võib tekkida ainult kristallivõre vahendusel. Arvutused näitavad, et see tõmbejõud on kõige tugevam, kui elektronide impulsid (kiirused) ja spinnid on vastassuunalised.

Sama nähtust kvantmehaanika "keeles" võib vaadelda kui võre ergastuse kvantide - foononite - vahetust elektronide vahel. Elektron liikudes kristallivõres, rikub võre võnkumiste režiimi - tekitab foononeid. See ergastusenergia antakse

teisele elektronile, mis neelab selle. Niisuguse foononite vahetuse tulemusena tekibki elektronide vahel tõmbejõud. Kui see tõmbejõud osutub suuremaks elektronide vahelisest kuloonilisest tõukejõust, moodustubki Cooperi paar. Energeetiliselt on see "kasulik".

Niisugust paari ei saa vaadelda kui kahte ühtekleepunud elektroni. Elektronide vahemaa paaris $L \approx 10^{-4}$ cm, s.t. on 4 suurusjärku suurem aatomitevahelisest kaugusest võres. Seejuures need paarid vahetavad kogu aeg elektrone, elektron lahku paarist ja moodustab paari teise elektroniga. Ruumalal L^3 paikneb $\sim 10^6$ niisugust paari. Seetõttu ei saa neid paare vaadata isoleeritult e. kvantmehaanika keeles - tekib kõigi paaride lainefunktsioonide kolossaalne kattumine, mistõttu kõigi paaride elektronid osutuvad omavahel seotuteks.

Seega paaride moodustumine on kollektiivne efekt. Niisugune paar ei moodustu kahest isoleeritud elektronist. Paaride moodustumisest võtavad osa nii elektronid kui kristallivõre.

Paaride moodustumisest ei võta osa mitte kõik vabad elektronid. Kuna see protsess on seotud elektronide energia muutumisega, siis võivad sellest osa võtta ainult Fermi taseme lähedastel tasemetel asuvad elektronid (ainult nende energia võib muutuda). Arvutus näitab, et selliste elektronide arv on $\sim \frac{1}{10^4} = 10^{-4}$ vabade elektronide koguarvust.

Kuna Cooperi paaris on elektronide spinnid vastassuunalised, siis paari kui terviku spinn on 0. Seega niisugune paar on boson. Bosonid on madalal temperatuuril energetiliselt peamiselt põhiolekus, millest neid on suhteliselt raske viia ergastatud olekusse. Seetõttu Cooperi paarid, mis on saanud suunatud liikumise, püsivad selles olekus kuitahes kaua. Niisugune suunatud liikumine ongi ülijuhtivus.

Püüame asja lähemalt selgitada energetilisest seisukohast. Paaride moodustumine muundab elektronide energiaspektrit. Paari moodustumisel elektronide energia väheneb seoseenergia E_g võrra. Paari lõhkumiseks on vaja energiat. See energia E_g on ühtlasi minimaalne energia, mida paar saab

väljaspoolt juurde võtta. Kuna foononite kontsentratsioon ja energia madalal temperatuuril on väike, siis foononite energiast ei piisa paaride lõhkumiseks. Paarid ei saa foononitelt e. kristallivõre võnkumistelt energiat juurde võtta. See aga tähendabki, et võre ei osuta paaride liikumisele mingit takistust.

Temperatuuri tõusuga ilmuvad foononid, mis võivad elektronidele anda paari lõhkumiseks piisavat energiat. Kuna foononite energia ja kontsentratsioon temperatuuri tõusuga kasvavad, siis lõhutakse järjest rohkem paare. Kriitilisel temperatuuril T_k paarid kaovad ja ülijuhtivus kaob.

Lõpuks - katseliselt on kindlaks tehtud, et ülijuhtivuse korral on voolukandjate laeng $2e$.

Josephsoni efekt

Efekt seisneb selles, et kui kahe ülijuhi vahele paigutada üliõhuke (~ 1 nm) dielektriku kiht ja ülijuhtidele rakendada pinge, siis dielektrikut läbib vool. Niisugust dielektriku kihti nimetatakse Josephsoni üleminekuks (siirdeks).

Kui ülijuhtidele rakendatud alalispinge on küllalt väike, on vool samuti väike. Sel juhul läbib kontakti alalispinge ja pingelang dielektrikul $U = 0$. Seega dielektriku kiht muutub samuti ülijuhiks. Nähtus on seletatav kui tunneliefekt.

Elektronid - Cooperi paarid - läbivad "keelatud" piirkonna. Kirjeldataud nähtus on statsionaarne Josephsoni efekt.

Kui vool läbi siirde ületab teatava, kriitilise väärtuse, siis tekib dielektriku äärel pinge ja vool muutub vahelduvaks, ühtlasi hakkab kontakt kiirgama elektromagnetlaineid. Niisugust nähtust nimetatakse mittestatsionaarseks Josephsoni efektiks. Kiirguse sagedus

$$\omega = \frac{2eU}{\hbar}, \quad (657)$$

kus U on pinge dielektriku äärel (see on alalispinge);

$2e$ - Cooperi paari laeng.

Ühtlasi laseb kontakt läbi ka niisuguse sagedusega va-

haldavvoolu, mida võis vaadata omalaadse resonantsi nähtu-
sena.

Josephsoni efekti kasutatakse kõrgsagedusliku elekt-
romagnetkiirguse tekitamiseks ja mõningates ülitäpsetes
mõõtmistes.

Metallide kontakt

Esimeses lähenõuses võime vabu elektrone metallis vaa-
delda ristkülikukujulises potentsiaali augus asuvatena. Va-
ba elektroni potentsiaalne energia metallis on määratud sel-
le potentsiaali augu põhjaga (valentstsooni põhjaga). See-
juures on potentsiaalse energia nullnivooks metallist väl-
jaspool asuva elektroni potentsiaalne energia. Metalli sees
(potentsiaali augus) asuva elektroni potentsiaalne energia
on alati negatiivne.

Kui seni rääkisime valentstsooni elektroni energiast
ja Fermi energiast, siis oli see kineetiline energia. Sel-
le energia mõõtmisel on nullnivooks valentstsooni põni.

Meenutame, et valentstsooni tasemed on keskmisel täi-
detud Fermi tasemeni (Fermi tasemel asub keskmiselt üks
elektron, tema täituvuse tõenäosus on 1/2).

Seoses sellega tuleks täpsustada elektroni väljumis-
töö mõistet. Väljumistöö all mõistame minimaalset energiat,
mida tuleb juurde anda Fermi tasemel olevale elektronile,
et teda metallist välja viia. Väljumistöö

$$A = |E| = |E_p + E_F| = |E_p| - E_F, \quad (658)$$

kus E on Fermi tasemel oleva elektroni koguenergia ($E < 0$);

E_p - elektroni potentsiaalne energia valentstsoonis
($E_p < 0$);

E_F - Fermi energia ($E_F > 0$).

Vaatleme kahte metalli. Eeldame, et Fermi tasemel asu-
va elektroni koguenergia esimeses metallis on suurem kui
teises $E_1 > E_2$ ($A_1 < A_2$). Kui viia niisugused metallid kontak-
ti, hakkavad elektronid vastavalt energia miinimumi printsii-
bile esimesest metallist teise üle minema. Vabu tasemeid on

seal piisavalt. Selle ülemineku tõttu laadub esimene metall positiivselt, teine - negatiivselt (esimene omandab positiivse potentsiaali, teine negatiivse). Positiivse potentsiaali juures elektroni kui negatiivse laengu potentsiaalne energia väheneb, s.t. kõik energiatasemed energiadiagrammil liiguvad allapoole. Teises metallis vastupidi - elektronide energianivood tõusevad ülespoole. Teisest küljest: kontakti kohas tekib elektriväli, mis hakkab takistama elektronide edasist üleminekut. See väli on seda tugevam, mida rohkem elektrone on üle läinud. Tasakaal saabub siis, kui Fermi tasemel olevate elektronide koguenergia kummaski metallis saab võrdseks ehk teisiti - kui Fermi tasemed mõlemas metallis ühtlustuvad (nullnivoo suhtes, milleks on metallist eemaldunud vaba elektroni potentsiaalne energia).

Elektronide üleminekute tõttu tekib metallide vahel nn. kontaktpotentsiaalide vahe $\varphi_1 - \varphi_2$. Tasakaalu korral peab kontaktpotentsiaalide vahest tingitud elektronide energiatega erinevus võrduma elektronide potentsiaalsete energiatega erinevusega:

$$e(\varphi_1 - \varphi_2) = E_{p_2} - E_{p_1} = E_{F_1} - E_{F_2},$$

kust

$$\varphi_1 - \varphi_2 = \frac{E_{F_1} - E_{F_2}}{e}. \quad (659)$$

See on nn. sisemine potentsiaalide vahe.

Kui moodustada ahel mitmest erinevast metallist, siis kontaktpotentsiaalide vahe ahela otstel on samasugune kui naabrite metallide vahetul kokkupuutel. Kui moodustada mitmest metallist suletud ahel, siis kontaktpotentsiaalide vahede algebraline summa kogu ahelas on null e. kogu ahela elektromotoorjõud on null.

Pooljuhid, Omajuhtivus

Pooljuhid moodustavad elektrijuhtivuse poolest vahepealse klassi metallide ja dielektrikute vahel. Kuid nende

jaoks pole iseloomulik mitte juhtivuse väärtus, vaid see, et nende juhtivus kasvab temperatuuri tõusuga (vastupidi metallidele). Nagu eespool nägime, on pooljuhtidel 0 K juures valentstsoon täielikult täidetud, vaba tsoon aga tühi. Keelutsooni laius pole suur (alla 1 eV).

Pooljuhtide korral eristatakse nn. omajuhtivust ja lisandjuhtivust. Ainult omajuhtivus esineb keemiliselt puhastel defektivaba võrega kristallidel. Nimetame neid edaspidi puhasteks pooljuhtideks.

Temperatuuril 0 K on puhas pooljuht absoluutne iso-laator. Temperatuuri tõusul ületavad aga mõningad elektronid soojusliikumise energia arvel keelutsooni ja lähevad valentstsoonist vabasse tsooni, kus nad võivad elektrivälja mõjul minna vabadele kõrgematele tasemetele. Vaba tsoon muutub juhtivustsooniks. Seega juhtivustsoonis on mõningane arv voolukandjaid - elektrone, mis täidavad juhtivustsooni põhja lähedasi tasemeid. Samal ajal valentstsooni ülemistel tasemetel vabaneb sama arv kohti. Sellist elektroniga mitte-täidetud kohta valentstsoonis (mis absoluutse 0 juures on täielikult täidetud) nimetatakse auguks. Auk (nagu foonongi) on kvaasiosake.

Selline elektronide jaotus pooljuhhis on määratud Fermi funktsiooni $f_F(E)$ käiguga. Arvutused näitavad, et Fermi tase E_F asub puhastes pooljuhtides peaaegu täpselt (0 K juures täpselt) keelutsooni keskel. Meenutame, et $f_F(E)$ määrab osakeste arvu tasemel ($n = 2f_F(E)$). Seejuures Fermi funktsioon "ei tea", kas antud kohal tase on olemas või mitte. Keelutsoonis $E = E_F$ juures muidugi lubatud energiataset pole.

Tavalistel temperatuuridel on rõhuva enamuse valentstsooni tasemete jaoks $f_F(E) = 1$, mõningane langus algab valentstsooni lae lähedal (sealt on mõningad elektronid lahkunud), $f_F(E)$ "saba" ulatub vabasse tsooni (sinna on mõningad elektronid üle läinud), keelutsooni keskel (kus $E = E_F$) $f_F(E) = 1/2$. Seega juhtivustsooni alumiste tasemete jaoks $E - E_F \approx \frac{E}{2}$ (E_g on keelutsooni laius). Nende tasemete jaoks on $f_F(E)$ väärtus väike.

Seetõttu võime

$$f_F(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{E-E_F}{kT}} = e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (660)$$

Teisiti: juhtivustsooni elektronide jaoks kehtib Boltzmanni jaotus. Nad käituvad mittemandunud gaasina, kuna vabade tasemete arv on suur. Juhtivustsooni üle läinud elektronide arv on võrdeline $f_F(E)$ -ga. Need elektronid (samuti, nagu kohe näeme, täpselt sama arv auke) on voolukandjateks. Juhtivuse sõltuvus temperatuurist on peaaegu täielikult määratud voolukandjate kontsentratsiooniga (liikuvus sõltub temperatuurist vähe). Kuna juhtivus on võrdeline voolukandjate kontsentratsiooniga, siis

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (661)$$

Kui $T \rightarrow \infty$, siis $\sigma \rightarrow \sigma_0$. Juhtivus kasvab temperatuuri tõusuga. Seost (661) kasutatakse keelutsooni laiuse E_g eksperimentaalseks määramiseks.

Tüüpilisteks pooljuhtideks on perioodilisuse süsteemi neljanda rühma elemendid Ge, Si, Se, Te (samuti keemilised ühendid GaAs, InAs, InSb). Nad moodustavad nn. teemandi tüüpi võre, milles iga aatom on seotud kovalentsete sidemetega nelja võrdsele kaugusel asuva naabriga. Sideme-elektronid ongi valentstsooni elektronid. Soojusliikumise energia mõjul võib elektron lahkuda sidemest ja muutuda vabaks elektroniks (üle minna vabasse tsooni). Elektroni poolt mahajäetud kohas kaob elektriline neutraalsus, selles kohas tekib laeng $+e$, moodustub auk. Sellele kohale võib minna elektron naabersidemelt jne. Tagajärjeks on, et auk võib hakata rändama kristallis samuti kui vaba elektron. Kui vaba elektron kohtub auguga, täidab ta tühja koha sidemes - elektron ja auk rekombineeruvad. Sel juhul lähevad

juhtivuse jaoks kaduma nii auk kui vaba elektron. Energia-
diagrammil vastab rekombinatsioonile elektroni üleminek
vabast tsoonist valentstsooni tühjale kohale.

Seega toimub pooljuhis samaaegselt pidevalt kaks
vastupidist protsessi: elektronide ja aukude paariviisiline
teke ja nende rekombinatsioon. Esimese protsessi tõenäosus
kasvab temperatuuri tõusuga, rekombinatsiooni tõenäosus aga
on võrdeline vabade elektronide ja aukude arvuga. Seetõttu
vastab igale kindlale temperatuurile kindel tasakaaluline
vabade elektronide ja aukude kontsentratsioon, mis muutub
temperatuuriga seaduspärasuse (660) järgi.

Kui väline elektriväli puudub, siis liiguvad elektro-
nid ja augud kaootiliselt. Kui tekib väli, saavad nad suu-
natud liikumise. Elektronid kui negatiivsed laengud liigu-
vad vastupidi välja suunale, augud - välja suunas. Tekib
vool. Märgatav omajuhtivus ilmneb ainult küllalt kõrgetel
temperatuuridel.

Puhaste pooljuhtide takistuse sõltuvust temperatuu-
rist kasutatakse temperatuuritundlike takistite - termota-
kistite e. termistoride valmistamisel. Viimaseid omakorda
kasutatakse temperatuuri mõõtmiseks, optilise kiirguse re-
gistreerimiseks (bolomeetrid), mitmesugustes releedes ja
pingestabilisaatorites.

Elektroni efektiivne mass

Elektroni de Broglie lainepikkus

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (662)$$

kus p on impulss.

Lainearv

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar},$$

kust

$$p = \hbar k. \quad (663)$$

Elektroni kiirus

$$v = \frac{p}{m} = \frac{\hbar}{m} k. \quad (664)$$

Vaba elektroni energia (kineetiline energia)

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (665)$$

Võtame viimasest tuletise k järgi:

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k,$$

kust

$$k = \frac{m}{\hbar^2} \frac{dE}{dk}. \quad (666)$$

Paigutame saadud k väärtuse avaldistesse (663) ja (664):

$$p = \frac{m}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (667)$$

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (668)$$

Viimased avaldised jäävad õigeks mitte ainult vaba elektroni jaoks, vaid ka elektroni jaoks, mis liigub kristallivõre perioodilises väljas. Muidugi on seos E ja k vahel siis teistsugune kui avaldises (665). Impulssi nimetatakse sel juhul kvaasiimpulsiks.

Mõjugu elektronile väline jõud (näiteks väljajõud $F = -e\mathcal{E}$). Selle mõjul saab elektron kiirenduse:

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}. \quad (669)$$

Aja dt vältel teeb jõud töö

$$dA = Fv dt = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt.$$

See töö läheb elektroni energia suurendamiseks: $dA = dE$.

$$dE = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt,$$

kust

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}$$

Paigutame viimase kiirenduse avaldisse (669). Saame:

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F. \quad (670)$$

Võrdleme viimast Newtoni II seadusega:

$$a = \frac{F}{m}$$

Näeme, et välise jõu mõjul liigub elektron kristallivõre perioodilises väljas keskmiselt nii nagu liiguks vaba elektron, kui tema mass oleks

$$m_{ef} = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2}. \quad (671)$$

See ongi elektroni efektiivne mass kristallivõres.

Seega: elektroni efektiivne mass on elektroni selline mass, mida ta omaks, kui vaadelda tema liikumist võres kui vaba elektroni liikumist (tegelikult ta seda pole; talle mõjub peale välise jõu veel F_{krist}).

Vaba elektroni jaoks

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2; \quad \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k; \quad \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m} \quad \text{ja}$$

$m_{ef} = m$, s.t. efektiivne mass ja tegelik mass langevad kokku.

Metallides võib valentselektrone küllalt suure täpsusega vaadelda vabadena. Seega seal $m_{ef} \approx m$.

Teisiti on asi pooljuhtides. Tsooni põhja lähedal $m_{ef} \approx m$. Edasi energia kasvades m_{ef} kasvab ja tsooni keskel $m_{ef} \rightarrow \infty$, s.t. niisugusele elektronile ei avalda väline väli mingit mõju. Tsooni lae lähedal $m_{ef} < 0$, s.t. niisugune elektron omandab jõuga vastassuunalise kiirenduse.

Püüame elektroni niisugust kummalist käitumist seletada. Kristallivõres on elektronil nii kineetiline kui potentsiaalne energia. Välisjõudude töö võib minna nii ühe kui teise täiendamiseks: $A = \Delta E_k + \Delta U$. Sel juhul elektroni kiirus kasvab aeglasemalt kui vaba elektroni kiirus (kiirendus on väiksem) ning $m_{ef} > m$.

Kui kogu välisjõudude töö läheb ainult potentsiaalseks energiaks: $A = \Delta U$, siis elektroni kineetiline energia ja kiirus üldse ei kasva. Elektron käitub kui lõpmatu massiga osake, $m_{ef} = \infty$.

Lõpuks, kui potentsiaalseks energiaks läheb mitte ainult kogu välise jõu töö, vaid ka osa kineetilist energiat: $A - \Delta E_k = \Delta U$ ($\Delta E_k < 0$), siis elektroni kiirus väheneb, elektron aeglustub jõu toimetel, s.t. ta käitub kui negatiivse massiga osake.

Kasutades efektiivse massi mõistet, võime augu kui kvaasiosakese teket seletada järgmiselt. Pooljuhhis tekivad vakantsed, tühjad tasemed valentstsooni lae lähedal. Seal on elektroni $m_{ef} < 0$. Negatiivse laengu ja negatiivse massiga osakese kadumine on samavaarne positiivse laenguga $+e$ ja positiivse massiga $|m_{ef}|$ osakese tekkega.

Lisandjuhtivus

Lisandite all mõistame nii teist liiki aatomeid kui ka mitmesuguseid kristallivõrede defekte - kõike seda, mis muudab energiatasemeid. Tegelikult sisaldab kuitahes puhas

pooljuht alati teataval määral lisandeid. Sageli viiakse neid sisse teadlikult.

Näitena vaatame 4-valentse germaaniumi kristalli, milles mõningad aatomid on asendatud 5-valentse fosfori aatomitega. Kovalentseteks sidemeteks germaaniumi aatomitega piisab neljast elektronist, viies valentselektron osutub üleliigseks ja soojusliikumise tagajärjel ta eraldub kergesti aatomist, moodustades vaba elektroni. Seejuures selle vaba elektroni tekkel ei purustata kovalentseid sidemeid, s.o. ei teki auku. Kuigi lisandi aatomi juures tekib positiivne laeng, on see seotud lisandi aatomiga ja võres liikuda ei saa. Tänu sellele laengule võib lisandi aatom haarata lähima vaba elektroni, kuid seos sellega on ikkagi nõrk ja võib jälle katkeda võre soojusvõnkumiste tõttu. Seega 5-valentne lisand tekitab vaid ühte liiki voolukandjaid - elektrone. Sel juhul on tegemist elektronjuhtivusega. Elektronjuhtivusega pooljuhti nimetatakse n-tüüpi (n - negatiivne) pooljuhtiks. Lisandeid, mis tekitavad elektronjuhtivust, nimetatakse doonoriteks.

Nagu mainitud, muudavad lisandid energiatasemeid. 5-valentne lisand on doonor, kui ta tekitab keelutsoonis lubatud taseme - doonortaseme - vaba tsooni põhja lähedal. Kui uus tase tekib valentstsooni lae lähedal, ei muuda ta märgatavalt kristalli elektrilisi omadusi. Sel juhul on viies valentselektron tugevasti seotud oma aatomiga. Tavaliselt paiknevad doonortasemed mõne sajandiku eV kaugusel vaba tsooni põhjast. Nihkub ka Fermi tase, tavalistel temperatuuridel paikneb see n-tüüpi pooljuhtis vaba tsooni põhja ja doonortaseme vahel. Temperatuuri tõusuga nihkub ta allapoole.

Kuna doonortase paikneb vaba tsooni põhja lähedal, siis piisab vähesest soojusliikumise energiast, et elektron (5. valentselektron) võiks doonortasemelt üles minna vabasse tsooni. See üleminek vastabki selle elektroni eraldumisele oma-aatomi juurest ja muutumisele vabaks elektroniks. Vabasse tsooni üle läinud elektron muutub juhtivuselektroniks.

Järgmise näitena vaatame 4-valentse räni kristalli,

milles mõningad aatomid on asendatud 3-valentse boori aatomitega. Boori kolmest valentselektronist ei piisa ko-valentsete sidemete teostamiseks nelja naaberaatomiga. Üks sideme-elektron jääb puudu. Tekib koht, mis võib haarata elektroni. Kui sellele kohale lähed sidemelektron naaberaatomite juurest, tekib auk. Lisandi aatomi lähedal tekib negatiivne laeng, kuid see on seotud lisandi aatomiga ega või olla voolukandjaks. Seega tekitab selline lisand ainult ühte liiki voolukandjaid - auke. Sel juhul on teginist aukjuhtivusega. Aukjuhtivusega pooljuhti nimetatakse p-tüüpi pooljuhiks. Lisandeid, mis tekitavad aukjuhtivust, nimetatakse aktseptoriteks.

Lisand on aktseptor, kui ta tekitab keelutsoonis lubatud taseme - aktseptortaseme - valentstsooni lae lähedal. Tavalistel temperatuuridel paikneb Fermi tase aktseptortaseme ja valentstsooni lae vahel. Temperatuuri tõusuga nihkub ta ülespoole.

Augu tekkimisele vastab energiadiagrammil elektroni üleminek valentstsoonist aktseptortasemele. Vastupidine üleminek vastab ühe seoselektroni ärarebinisele lisandi aatomi juurest ja tema rekombineerumisele auguga.

Lisanditasemete põhimõtteline erinevus tsoonide tasemetest seisneb selles, et need on lokaalsed tasemed. Kui Pauli printsiip tsoonide tasemete jaoks kehtib kogu kristalli kohta tervikuna (igale tasemele võib minna elektron, mis asub mis tahes kohas), siis lisanditasemetele võivad minna vaid lisandi aatomi lähedal asuvad elektronid. Seetõttu võib ühesuguseid lisanditasemeid olla palju (nii palju, kui on lisandi aatomeid).

Temperatuuri tõusuga saavutab lisandvoolukandjate kontsentratsioon kiiresti küllastuse. See tähendab, et kõik doonortasemed on vabad, aktseptortasemed aga täidetud. Edasisel temperatuuri tõstmisel kasvab kiiresti omajuhtivus, mis on tingitud elektronide üleminekutest valentstsoonist vabasse tsooni. Seetõttu kõrgetel temperatuuridel seisneb juhtivus nii lisandjuhtivuses kui omajuhtivuses. Madalatel temperatuuridel on ülekaalus lisandjuhtivus, kõrgetel - omajuhtivus.

Juhtivuse sõltuvus temperatuurist on kvalitatiivselt järgmine. Madalatel temperatuuridel kasvab juhtivus peamiselt lisandjuhtivuse kasvu tõttu. Seejärel saavutab lisandjuhtivus küllastuse, omajuhtivus on aga veel väike. Kuna voolukandjate liikuvus aga temperatuuri tõusuga langeb, siis juhtivus väheneb. Edasisel temperatuuri tõstmisel hakkab juhtivus järsult kasvama tänu omajuhtivuse kasvule.

p-n siire. Pooljuht-dioodid

Pooljuhtseadmete peamiseks elemendiks on nn. p-n siire. See kujutab endast õhukest kihti kahe erinevat tüüpi lisandjuhtivusega pooljuhi piirpinna lähedal.

Läbi piirkihi hakkavad p-alast n-alsse difundeeruma augud ja n-alast p-alsse elektronid, n-ala augud rekombineeruvad elektronidega, p-ala elektronid aukudega. Selle tõttu siirde piirkond vaesestub voolukandjatest ja omandab suure elektrilise takistuse. Ühtlasi omandab p-ala negatiivse potentsiaali (aktseptorite läheduses jääb negatiivne laeng osaliselt kompenseerimata), n-ala aga positiivse potentsiaali (kompenseerimata jääb positiivne laeng doonorite läheduses). Tekib elektriline kaksikkiht - tõkkekiht. Tekkiv elektriväli takistab voolukandjate edasist difundeerumist ja siirdel tekib tasakaal.

Tekkiv elektriväli viib energiatasemete nihkumisele. p-ala nihkuvad kõik elektronide energiatasemed negatiivse potentsiaali tõttu ülespoole (negatiivse laengu energia negatiivse potentsiaaliga väljas kasvab), n-ala aga laskuvad positiivse potentsiaali tõttu allapoole. Tasakaal saabub jällegi (nagu kahe metalli kontakti korralgi) siis, kui Fermi tasemed mõlemas alas ühtlustuvad.

Elektroni potentsiaalse energia muutuse üleminekul ühest alast teise annab näiteks valentstsooni lae kõik (meenutame, et elektronide potentsiaalne energia tsoonis on ühesugune). Seega elektroni potentsiaalne energia üleminekul n-alast p-alsse tõuseb, elektroni üleminek on tõkestatud potentsiaali barjääriga.

Aukude potentsiaalse energia kõver käitub vastupidi.

Augu kui positiivse laengu energia kasvab n-alas ja väheneb p-alas. Järelikult on augu üleminek p-alast n-allas samuti tõkestatud potentsiaali barjääriga. Tõkkekiht ei juhi elektrit.

Potentsiaali barjääri kõrgust mõlemat liiki voolukandjate jaoks võib muuta välise pingestamisega. Kui anda p-alale positiivne potentsiaal ja n-alale negatiivne potentsiaal, siis barjäär väheneb, ühtlasi väheneb tõkkekihi ruumiline ulatus. Siire hakkab juhtima. Sellist pinget nimetatakse pärisuunaliseks.

Vastassuunaline pinge tõstab barjääri mõlemat liiki voolukandjate jaoks, samuti suureneb tõkkekihi ruumiline ulatus. Siire ei juhi. On olemas ainult nõrk vool, mis on tingitud nn. mittepehnilistest voolukandjatest (vähesed augud n-alas ja vähesed elektronid p-alas). Väga suure vastassuunalise pinge korral tekib elektriline läbilöökk.

Pärisuunalise voolu jaoks kehtib seos:

$$I = I_s \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right), \quad (672)$$

kus I_s on vastassuunaline küllastusvool;

U - välispinge ($U > 0$ - pärisuunaline, $U < 0$ - vastassuunaline).

Seega võib p-n siiret kasutada alaldina - dioodina. Pooljuhtdiodide puuduseks, võrreldes elektronlamp-diodidega, on väikese vastassuunalise voolu olemasolu, eeliseks aga märgatavalt suurem võimsus.

Sisemine fotoefekt

Elektronide üleminekud energiatasemete vahel pooljuhis võivad toimuda valguskvandi toimel. Nähtava valguse kvandi energia (1,5 - 3 eV) on piisav selleks, et elektroni üleviia valentstsoonist juhtivustsooni või valentstsoonist akseptortasemele (p-tüüpi pooljuht) või doonortasemelt vabasse tsooni (n-tüüpi pooljuht). Kõik need üleminekud tekitavad täiendavaid voolukandjaid. Niisugust nähtust nimetatakse sisemiseks fotoefektiks. Selle tagajärjel suureneb pooljuhi elektrijuhtivus, mida sel juhul nimetatakse fotojuhtivuseks.

Sisemisel fotoefektil tugineb fototakistite töö. Valguse toimele tekivate voolukandjate arv on võrdeline valgusvooga. See võimaldab fototakistiteid kasutada fotomeetrias.

Ventiil-fotoefekt

p-n siirde piirkonnas tekib valguse toimele nn. ventiil-fotoefekt, mille tagajärjel siire muutub vooluallikaks.

Valguskvantide mõjul toimuvate üleminekute tõttu valentstsoonist vabasse tsooni, mis toimuvad nii n-alas kui p-alas, tekivad mittepõhilised voolukandjad: elektronid p-alas ja augud n-alas (muidugi tekivad ka põhilised voolukandjad). Mittepõhilised voolukandjad läbivad takistamatult siiret. Seetõttu p-ala laadub positiivselt, n-ala negatiivselt. Tekib täiendav potentsiaalide vahe p-arisuunas. See ongi foto-elektromotoorjõud. Üleminek muutub vooluallikaks. Mitmest järjestikku ühendatud p-n siirdest võib moodustada paikese-patarei.

Luminesentsi tahketes kehaes

Valgust kiirgavad tavaliselt kuumutatud kehad (soojuskiirgus).

Mõningad kehad võivad helenduda, kui neid kiiritada nähtava valgusega, ultraviolettkiirgusega, röntgenikiirgusega, γ -kiirgusega või kui neid pommitada elektronide jt. laetud osakestega, samuti keemiliste reaktsioonide mõjul. Seejuures võivad kehad väljastada nähtavat valgust, kuigi nende temperatuur on madal. Niisugust külma helendust nimetataksegi luminesentsiks, kehi, mis helenduvad - luminofoorideks.

Kui luminesents tekib valguse toimele, on tegemist fotoluminesentsiga. Allpool vaatlemegi ainult seda.

Erinevalt soojuskiirgusest on luminesents mittetasa-kaaluline kiirgus. Luminesentsi tähtsaks iseärasuseks on tema märgatav kestus pärast ergutuse lakkamist, mis on märksa suurem valguslainete võnkeperioodist (10^{-13} ... 10^{-15} s). Luminesentsikiirgus kestab vähemalt 10^{-10} s pärast ergutuse lakkamist, sageli aga palju kauem (sekundid, minutid, tunnid või isegi kuud). Seega: luminesentsiks nimetatakse antud

temperatuuril soojuskiirgust ületavat kiirgust, mille kestus on märgatavalt suurem kiirgavate lainete perioodist.

Sõltuvalt kestusest jaotatakse fotoluminestsentsid: 1) fluorestsentsiks ($< 10^{-6}$ s), 2) fosforestsentsiks ($> 10^{-6}$ s).

Stokesi reegel: luminestsentskiirguse lainepikkus on suurem teda ergutava kiirguse lainepikkusest.

Selle reegli kehtivus pole absoluutne. On võimalik ka nn. antistokesiline kiirgus, mille lainepikkus on lühem ergutava kiirguse lainepikkusest.

Luminestsentsi energeetiline saagis on luminestsenteeruva keha poolt täielikult väljakiirgamisel väljastatava energia ja keha poolt luminestsentsi ergutamisel neelatava energia suhe.

$$\eta = \frac{E}{E_0} \quad (673)$$

Vavilovi seadus

Luminestsentsi energeetiline saagis kasvab võrdeliselt ergutava valguse lainepikkusega, seejärel, teatava lainepikkuse juures, langeb järsult nullini.

Luminestsentsi tekkemehanism tahketes kehtes

Väga puhtad ja defektivabad kristallid ei luminestsenteeru. Selleks et tekitada luminestsentsi, on vaja võres tekitada defekte või viia sinna lisandi aatomeid. Lisandeid nimetatakse aktivaatoriteks. Tavaliselt ei ületa aktivaatori kontsentratsioon kristallis mõnda sajandikku protsenti. Põhilistes kristallfosfoorides on põhiaineks ZnS, CdS, CaS jt., aktivaatoriteks aga metallid Ag, Cu, Bi, Mn jt.

Lisandi aatomid tekitavad keelutsooni alumises osas lubatud energiatasemed - lisanditasemed (valentsatsioon on täidetud). Ergutava kvandi energia mõjul läheb elektron lisanditasemelt vabasse tsooni (aktivaatori aatom ioniseeritakse) ja ta muutub juhtivuselektroniks. See elektron rändab kristallis seni, kuni ta kohtub lisandi iooniga ja rekombineerub sellega. Energiadiagrammil vastab sellele elektroni

üleminek vabast tsoonist lisanditasemele, millega kaasneb fluorestsentskiirgus. Kiirguse "hilinemine" on $\sim 10^{-9}$ s. Seega helendus on lühiaegne ja kaob peaaegu kohe peale ergutava kiirguse katkemist.

Selleks et saada kestvat helendust - fosforestsentsi - peab luminofoor peale aktivaatori sisaldama veel nn. püüniseid e. lõkse, s.o. tasemeid, mis paiknevad keelutsoonis vaba tsooni põhja lähedal. Neid võivad tekitada samuti lisandid või mitmesugused võre defektid. Endiselt lähevad elektronid ergutava kiirguse mõjul esialgu aktivaatori tasemetelt vabasse tsooni, sealt aga peamiselt püünistesse, kus nad kaotavad liikuvuse ja koos sellega võime rekombineeruda aktivaatori iooniga. Püünisest vabanemiseks peab elektron saama energia E_L (E_L võrdub vaba tsooni põhja ja püünisetaseme vahega). Selle energia võib elektron saada võre soojusvõnkumistelt - foononitelt. Püünises viibimise aeg

$$\tau \sim e^{-\frac{E_L}{kT}}$$

Kui E_L on küllalt suur, võib ka τ olla küllalt suur. Püünisest vabanenud elektron satub vabasse tsooni ja rändab kristallis seni, kuni jälle satub püünisesse või rekombineerub aktivaatori iooniga. Viimasel juhul tekibki luminescentskiirguse kvant.

Mitte kõigi elektronide üleminekutega madalamatele niivõodele ei kaasne valguskvandi kiirgamine. Sagedamini tekitavad selle tagajärjel foononid. Kvantteooria seletab nii Stokesi reegli kui Vavilovi seaduse.

Stokesi reegel. Kristalli kiiritamisel läheb kvandi energia osaliselt aktivaatori aatomite ergastamiseks, osaliselt - võre võnkumiste energiaks (siseenergiaks). Seetõttu on kiiritava kvandi energia suurem luminescentskiirguse kvandi energiast ($\varepsilon_0 > \varepsilon$; $h\nu_0 > h\nu$; $\lambda_0 < \lambda$).

Kiiritava kvandi energia ε_0 võib aga ka liituda rekombinatsioonil tekkiva kvandi energiaga. Sel juhul tekib kvant, mille energia on suurem kiiritava kvandi energiast.

See ongi antistouksiline luminestsents.

Vavilovi seadus. Vaatane lihtsamat juhust: iga kiir-
tav kvant $h\nu_0$ kutsub esile ühe luminestsentskiirguse kvan-
di $h\nu$ tekke (nn. kvantsaagis võrdub ühega). Siis energeeti-
line saagis

$$\eta = \frac{h\nu}{h\nu_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda}. \quad (674)$$

Seega $\eta \sim \lambda_0$. Kui $\lambda_0 > \lambda$ ($h\nu_0 < h\nu$), siis luminestsentsi ei
saa tekkida, η väheneb hüppeliselt ning muutub nulliks.

T U U M A - J A E L E M E N T A A R O S A K E S T E F Ü Ü S I K A

AATOMITUUMAD

Aatomituumade koostis

Aatomituumad koosnevad elementaarosakestest prootoni-
test (p) ja neutronitest (n). Nende ühisnimetuseks on nuklon.

Esiialgu arvati, et tuumad koosnevad prootonitest ja
elektronidest. Niisugune hüpotees seletas küll tuumade massi
ja laengut, kuid oli vastuolus rea teiste faktidega, näi-
teks tuumade impulsimomendi ja magnetmomendi väärtustega.
Samuti on elektroni viibimine tuumas vastuolus määramatuse
relatsiooni ja relatiivsusteooriaga.

1932. a. tõestasid Ivanenko ja Heisenberg, et tuumad
koosnevad prootonitest ja neutronitest.

Prooton

Prooton on vesinikuaatomi tuum. Tema mass $m_p = 1,67265 \cdot$
 $\cdot 10^{-27}$ kg = 1,007276 u* = 1836 m_e (m_e - elektroni mass).

* u on süsteemiväline ühik, aatommassi ühik; 1u =
 $-1,66057 \cdot 10^{-27}$ kg.

Prootoni laeng on $+e$. Prooton on fermion, tema spinnkvantarv $s = 1/2$. Omamagnetmoment (tema projektsioon)

$$\mu_p = 2,79 \mu_t, \quad (675)$$

kus μ_t on nn. tuuma magneton.

$$\mu_t = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 5,05 \frac{\text{erg}}{\text{Gs}}. \quad (676)$$

Meenutame, et elektroni omamagnetmoment (täpsemini - tema projektsioon) võrdub Bohri magnetoniga. Avaldiste (675) ja (553) võrdlemisest selgub, et $\mu_t = \frac{\mu_B}{1836}$. Prootoni omamagnetmoment on ~ 660 korda väiksem elektroni omamagnetmomentist.

Prooton on stabiilne osake.

Neutron

Elementaarosakese neutroni avastas Chadwick 1932. a. Neutroni mass $m_n = 1,67495 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1,008665 \text{ u} = 1839 m_e$. Neutroni mass on veidi suurem prootoni massist, $m_n - m_p \approx 2,5 m_e$. See erinevus pole suur, kuid tal on põhimõtteline tähtsus.

Neutron on elektriliselt neutraalne. Neutron on fermion, tema spinnkvantarv $s = 1/2$. Omamagnetmoment (projektsioon)

$$\mu_n = -1,91 \mu_t. \quad (677)$$

Miinusemärk tähendab seda, et neutroni spinn ja omamagnetmoment on vastassuunalised.

Vaba neutron on mittestabiilne. Neutroni keskmine eluiga on $\sim 10^3$ a. Ta laguneb prootoniks, elektroniks ja anti-neutrinoks.

Tuuma mõõtmed ja mass

Ääri igasugusel kvantsüsteemil pole ka tuumal täpselt määratletud piiri. Katsed (elektronide ja nuklonite hajuta-

mine tuumadelt) aga näitavad, et tuuma sisepiirkonnas on tuumaaine tihedus praktiliselt konstantne, piirkihis aga langeb tihedus sujuvalt nullini. Seetõttu loetakse tuuma raadiuseks kaugust tuuma keskpunkti ja selle punkti vahel, kus tuumaaine tihedus on vähenenud kaks korda (võrreldes tihedusega keskpunktis).

Erinevate tuumade raadiused muutuvad ligikaudu piirides $2 \dots 10 \cdot 10^{-13}$ cm. Võrdluseks meenutame, et aatomite mõõtmed on suurusjärgus 10^{-8} cm.

Tuumade raadiused on küllalt täpselt määratavad avaldisest:

$$r = r_0 \sqrt[3]{A}, \quad (678)$$

kus $r_0 = 1,3 \dots 1,7 \cdot 10^{-13}$ cm;

A - nn. massiarv - nuklonite arv tuumas.

Kuna aatommassiühikutes mõõdetud nukloni mass võrdub ligikaudu ühega, siis võrdub massiarv tuuma massiga, mõõdetuna aatommassiühikutes ja ümardatuna täisarvuks.

$$A = Z + N,$$

kus Z on prootonite arv,

N - neutronite arv.

Avaldisest (678) järeldub, et tuuma ruumala on võrdeline massiarvuga.

Tuumaaine tihedus on väga suur ($\sim 2 \cdot 10^{14}$ g/cm³).

Tuumade tähistused. Prootonite ja neutronite arv tuumas

Tuumade tähistamiseks kasutatakse sümbolit

$${}^A_Z X,$$

kus X on antud elemendi keemiline sümbol;

Z - prootonite arv tuumas ehk tuuma laeng mõõdetuna elementaarlaengutes e ($q = Ze$).

Looduses esinevad elemendid Z väärtusega 1 ... 92. Puuduvad elemendid Tc (Z=43) ja Pm (Z=61). Pu (Z=94) esineb

looduses tühises koguses.

Prootonite arvu kasvuga tuumas kasvab üldiselt ka neutronite arv. Seejuures kergete tuumade seas on ülekaalus sellised, mille $A = 2Z$ (s.t. $N=Z$) või $A = 2Z+1$ või $A = 2Z+2$. Suurust $A-2Z$ nimetatakse neutronite ülejäagiks. A kasvades neutronite ülejäak kasvab. Näiteks tuumal U_{92}^{238} $A - 2Z = 54$.

Isotoobid

Isotoopideks nimetatakse tuumi, milles on ühesugune arv prootoneid ($Z = \text{const}$), kuid erinev arv neutroneid.

Enamikul keemilistel elementidel on mitu isotoopi (näit. O_8^{16} , O_8^{17} , O_8^{18}).

Kuna ühe ja sama keemilise elemendi isotoopidel on ühesugune tuuma laeng, siis on neil ka ühesugune elektronkaar ja ühesugused keemilised omadused (tuum mõjutab elektrone peamiselt oma elektriväljaga). Isotoopide füüsikalised omadused võivad aga olla erinevad, näiteks isotoopidest K_{19}^{39} , K_{19}^{40} , K_{19}^{41} on ainult K_{19}^{40} radioaktiivne.

Looduses esinevad ühe ja sama elemendi erinevad isotoobid alati kindlas vahekorras ehk kindla kaaluga. Mendelejevi tabelis toodud elementide aatommassid kujutavad endast isotoopide aatommasside keskmist, arvestades nende esinemissagedust looduses.

Isobaarid

Isobaarideks nimetatakse ühesuguse massiarvuga ($A = \text{const}$), kuid erineva prootonite ja neutronite arvuga tuumi, näiteks Ar_{18}^{40} , Ca_{20}^{40} , K_{19}^{40} .

Isotoonid

Isotoonideks nimetatakse ühesuguse neutronite arvuga ($N = \text{const}$), kuid erineva nuklonite ja prootonite arvuga tuumi, näiteks C_6^{13} , N_7^{14} .

Tuumade impulsmomendid ja magnetmomendid

Tuuma impulsmoment e , tuuma spinn moodustub nuklonite

spinnidest ning orbitaalsetest momentidest. Nukloni spinnkvantarv on $1/2$, orbitaalkvantarv aga täisarv. Seetõttu tuuma spinn võib olla nii täisarvuline kui poolearvuline. Tuuma spinn (tema projektsiooni maksimaalväärtus)

$$L_I = I\hbar, \quad (679)$$

kus I on tuuma spinnkvantarv. Stabiilsetel tuumadel põhiolekus $I \leq 9/2$.

$$I = 0, 1/2, 1, 3/2 \dots 9/2. \quad (680)$$

Kõigil tuumadel, mis sisaldavad paarisarvu nukloneid, on I täisarvuline (kui nii Z kui N on paarisarvuline, on $I = 0$), tuumadel paaritu nuklonite arvuga on I poolearvuline.

Tuuma magnetmoment (projektsiooni maksimaalväärtus)

$$\mu = g \mu_N L_I, \quad (681)$$

kus g on nn. Lande faktor, mis erinevatel tuumadel on erinev. Suurusjärgult ei erine g palju ühest.

Elektronkätte ja tuuma magnetmomendi vastasmõju põhjustab aatomite spektraaljoonte ülilipeent struktuuri.

Tuumade seoseenergia

Tuuma mass on alati väiksem tema koostisosade - neutronite ja prootonite - masside summast (jutt on seisumassidest).
Vahe

$$\Delta m = Zm_p + Nm_p - m \quad (682)$$

nimetatakse massidefektiks (m on tuuma mass). Massidefekt on tingitud sellest, et tuuma moodustamisel neutronitest ja prootonitest vabaneb energiat. Seda energiat nimetatakse seoseenergiaks. Samasugust energiat on vaja tuuma lõhkumiseks koostisosadeks. Massi ja energia seose põhjal

$$E_s = \Delta mc^2. \quad (683)$$

Seoseenergia kasvab massiarvu A kasvades. Nuklonite seose tugevust tuumas ei iseloomusta aga kogu tuuma seoseenergia, vaid nn. eriseoseenergia, s.o. seoseenergia ühe nukloni kohta.

$$\varepsilon = \frac{E_s}{A}. \quad (684)$$

Eriseoseenergia sõltuvus massiarvust A on üldjoontes järgmine: väikeste A väärtuste korral ε kasvab järsult, seejärel kasv aeglustub; sõltuvus omab maksimumi $A \approx 56$ juures, järgneb aeglane langus. Tuumad massiarvuga 50 ... 60 on kõige stabiilsemad ($\varepsilon \approx 8,7$ MeV).

Eriseoseenergia niisugusel sõltuvusel tugineb tuumaenergia vabanemine. Tuumaenergiat vabaneb raskete tuumade jagunemisel kergemateks (jagunemise ahelreaktsioon) ja kergete tuumade ühinemisel raskemateks (termotuumareaktsioon).

Eriseoseenergia sõltuvus massiarvust pole sujuv. Esinevad "kohalikud" maksimumid. Nende asukohad vastavad nn. maagilistele tuumadele. Need on tuumad, millel kas Z või N omavad väärtust 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Maagilised tuumad on kõige stabiilsemad ja seetõttu universumis kõige enam levinud. Eriti stabiilsed on nn. kahekordselt maagilised tuumad, millel nii Z kui N omavad ülaltoodud väärtusi. Selliseid tuumi on ainult 5: He_2^4 , O_8^{16} , Ca_{20}^{40} , Ca_{20}^{48} , Pb_{82}^{208} . Maagiliste tuumade stabiilsust seletab nn. tuuma kihiline mudel - tuum (nagu aatomi) on eriti stabiilne, kui kiht (kate) on täidetud.

Tuumajõud

Eriseoseenergia väärtustest järeldub, et nuklonid on tuumas omavahel seotud väga tugevate tõmbejõududega. Jõude, mis mõjuvad nuklonite vahel, nimetatakse tuumajõududeks. Need jõud hoiavad nukloneid tuumas koos väga väikestel kaugustel, vaatamata prootonite elektrostaatiliselle tõukumisele. Tuumajõud kuuluvad tugeva vastasmõju liiki. Tugev vastasmõju on kõige tugevam looduses. Ta ületab märgatavalt gravitatsioonilise ja elektromagnetilise vastasmõju.

Võrreldes teiste jõududega, on tuumajõududel rida iseärasusi.

1. Tuumajõud on äärmiselt lähimõjulised ja sõltuvad väga tugevasti kaugusest. Tuumajõud hakkavad mõjuma kaugus-

tel alla $2 \cdot 10^{-13}$ cm, kaugustel alla $1 \cdot 10^{-13}$ cm lähevad tõmbejõud üle tõukejõududeks.

2. Tuumajõud ei sõltu nuklonite elektrilaengust. Tuumajõud on ühesugused kõigi paaride p-p, p-n, n-n jaoks. Tuumajõudude niisugust omadust nimetatakse laenguliseks sõltumatuseks.

3. Tuumajõud sõltuvad vastasmõjus olevate nuklonite spinnide orientatsioonist. Mõju on tugevam, kui spinnid on päripäraleelsed.

4. Tuumajõud on küllastuvad: antud nuklon võib olla vastasmõjus vaid piiratud arvu lähimate naabritega. See järeldeb sellest, et alates He_2^4 -st on eriseoseenergia ligikaudu konstantne. Kui kõik nuklonid tuumas oleksid omavahel seotud ühesuguste jõududega, siis peaks eriseoseenergia nuklonite arvu suurenemisel kasvama.

Nuklonite vastasmõju, nuklonite ja tuuma vastasmõju

Kuigi nuklonite vahel mõjuvad tuumajõud on ühesugused, sõltub nuklonite vaheline mõju nende laengust. Prootonite kui laetud osakeste vahel mõjuvad lisaks tuumajõududele (tõmbejõududele) veel kuloonilised tõukejõud. Seetõttu on kahe prootoni ühinemisel esmalt vaja ületada kuloonilistest tõukejõududest tingitud potentsiaali barjäär, sest kuloonilised jõud mõjuvad märksa suurematel kaugustel kui tuumajõud. Selleks peab prootonitel olema barjääri ületamiseks piisav kineetiline energia. Alles pärast seda, kui prootonid lähevad teineteisele tuumajõudude mõjuraadiuse kaugusele, saavad nad tuumajõududest tingitud potentsiaali auku. Õeldu kehtib täpselt samuti prootoni tungimise kohta tuuma.

Kahe neutroni, samuti neutroni ja prootoni lähenemine teineteisele ning neutroni tungimine tuuma pole seotud niisuguse potentsiaali barjääri ületamisega. Seetõttu võib näiteks neutron tungida vabalt tuuma. Tuumast väljumisel tuleb aga nii neutronil kui prootonil ületada tuumajõudude potentsiaali barjäär.

Tuumajõudude olemus

Kaasaja teooria käsitleb tuumajõude nn. vahetusjõudude-
dena. Nuklonite vastasmõju vahendajaks on tuumajõudude väli.
Iga nuklon tekitab enda ümber tuumajõudude välja, selles väl-
jas teistele nuklonitele mõjuvad jõud. Nii nagu elektromag-
netilist välja võib kvantelektrondünaamika seisukohalt vaa-
data selle välja kvantide - footonite kogumina, võib ka tuu-
majõudude välja vaadata selle välja kvantide kogumina. Tuum-
majõudude välja kvantideks on nn. π -mesonid e. piionid
(Yukawa hüpotees, 1935). On olemas laetud piionid - π^+
(laeng $+e$) ja neutraalsed piionid - π^0 . Piionite mass on
 $\sim 270 m_e$, nad on bosonid ($s = 0$). Piionid on mittestabiilsed
osakesed, laetud piionite eluiga on $\sim 10^{-8}$ s, neutraalsetel
 $\sim 10^{-16}$ s.

Tuumajõudude välja vaatleme kui piionite kogumit, s.t.
nuklon on ümbritsetud piionite pilvega. Piionite pilve moo-
dustumist võib vaadata kui piionite väljastamist nuklonite
poolt. Klassikalise teooria seisukohalt on piioni väljasta-
mine paigaloleva nukloni poolt võimatu. Selleks on vaja
energiat vähemalt $m_\pi c^2$. Selline protsess saab võimalikuks
tänu määratuse relatsioonile:

$$\Delta E \Delta t \geq h.$$

Selle seose põhjal ei ole võimalik energia jäävuse rikkumist
 ΔE võrra lühema aja jooksul kui Δt võimalik avastada. Võt-
tes $\Delta E = m_\pi c^2$, saame $\tau_\pi = \Delta t = \frac{h}{m_\pi c^2}$. Kui piion selle aja

vältel neelatakse teda väljastanud nukloni või mõne teise
nukloni poolt, siis on niisugune protsess võimalik. Aja
 τ_π jooksul võib piion eemalduda teda väljastanud nuklonist
maksimaalselt kaugusele

$$\lambda_\pi = c \tau_\pi = \frac{h}{m_\pi c} \quad (685)$$

λ_π on piioni Comptoni lainepikkus [vt. (467)].

Csakesi, mida väljastatakse või neelatakse energia

jäavuse seaduse näiva rikkumisega, nimetatakse virtuaalse-
teks. Nende eksisteerimise ajal ei ole neid võimalik avasta-
da.

Kvantteooria seletab tuumajõude virtuaalsete pionite vahetamisega, mida kiirgavad ja neelavad nuklonid. Niisugu-
ne vahetuslik iseloom on omane kõigile vastasmõjudele. Näi-
teks elektromagnetiline vastasmõju on seletatav virtuaalse-
te fotonite vahetamisega laengute vahel.

Kui nuklonite läheduses pole teisi osakesi, siis kõik nukloni poolt väljastatud pionid neelatakse sama nukloni poolt. Kahe nukloni lähenemisel teineteisele kuni nende pionpilvede osalise kattumiseni võib üks nuklon neelata teise nukloni poolt väljastatud piioneid. Selles seisnebki tuumajõudude vahetusiseloom. Avaldis (685) annab ühtlasi tuumajõudude mõjuraadiuse. Sama valemi abil võime arvutada ka elektromagnetjõudude mõjuraadiuse, asendades pion'i seisumassi fotoni seisumassiga. Kuna viimane on null, võib elektromagnetjõudude mõjuraadius olla piiramatult.

Virtuaalsete osakeste väljastamist ja neelamist nime-
tatakse samuti virtuaalseks protsessiks.

Virtuaalseteks protsessideks nuklonite ja pionite osavõtul võivad laengu jäavuse seadust arvestades olla järgmised:

$$p \rightleftharpoons n + \pi^+, \quad (686)$$

$$n \rightleftharpoons p + \pi^-, \quad (687)$$

$$p \rightleftharpoons p + \pi^0, \quad (688)$$

$$n \rightleftharpoons n + \pi^0. \quad (689)$$

Nooled osutavad sellele, et protsessid võivad toimuda mõle-
mas suunas. Protsessi (686) tõttu erineb prootoni magnetmo-
ment tuuma magnetonist. See on tingitud π^+ mesoni orbitaal-
liikumisest selle ajavahemiku jooksul, millal prooton viibib
virtuaalses olekus $(n + \pi^+)$. Vastavalt protsessile (687) vii-
bib neutron osa ajast virtuaalses olekus $(p + \pi^-)$. π^- me-
soni orbitaalliikumine tekitab neutroni magnetmomendi, mis
on vastassuunaline prootoni magnetmomendiga.

Kui nuklon saab vähemalt pioni seisue energiaga võrdse energia, võib virtuaalne pion jäädavalt lahkuda pionipilvest ja muutuda reaalseks pioniks. See võib toimuda suure energiaga nuklonite põrkel, näiteks



LOODUSLIK RADIOAKTIIVSUS

Radioaktiivne kiirgus

Radioaktiivsus on tuumade spontaanne lagunemine, millega kaasneb osakeste või tuumade kiirgumine, nn. radioaktiivne kiirgus. Radioaktiivsel lagunemisel muundub ühe keemilise elemendi isotoop teise elemendi isotoobiks.

Looduslikes tingimustes eksisteerivate tuumade radioaktiivsust nimetatakse looduslikuks radioaktiivsuseks. Tuumareaktsioonide abil saadud tuumade radioaktiivsust nimetatakse kunstlikuks radioaktiivsuseks. Põhimõttelist erinevust nende radioaktiivsuse liikide vahel pole, mõlemad alluvad samadele seaduspärasustele. Loodusliku radioaktiivsuse avastas Becquerel 1896. a. Looduslike ainete radioaktiivne kiirgus jaguneb: 1) α -kiirgus, 2) β -kiirgus, 3) γ -kiirgus. α -osakesed on He_2^4 tuumad, β -osakesed - elektronid, γ -osakesed - lühilainelise elektromagnetkiirguse kvandid.

Radioaktiivse nihke seadus

Radioaktiivse nihke seadus määrab, millise muundumise teeb tuum läbi radioaktiivsel lagunemisel.

α - lagunemise korral



kus X on laguneva tuuma (ematuuma) keemiline sümbol,

Y - tekkiva tuuma (tütaruuma) sümbol.

Valemiga (690) esitatud lagunemise skeem arvestab massi (ligikaudselt) ja laengu jäävuse seadust: lagunemisproduktide massiarvude summa (ülemised indeksid) võrdub ematuuma massiarvuga; lagunemisproduktide laengute summa (alumisid in-

deksid) võrdub ematuuma laenguga.

β -lagunemine:



kus e on elektron. Elektroni massiarv on 0.

γ -kiirgusel tuum ei muundu. Samuti ei esine γ -kiirgus iseseisva kiirguse liigina, γ -kiirgus kaasneb (teatud hilinemisega) α - või β -lagunemisega.

Radioaktiivsed perekonnad

Radioaktiivsed tuumad on omavahel geneetiliselt (oma sünni poolest) seotud: ühest tuumast tekib radioaktiivsel lagunemisel teine, mis samuti võib olla radioaktiivne jne. Niisugust omavahel seotud tuumade kogumit nimetataksegi radioaktiivseks perekonnaks. Looduslikud radioaktiivsed ained moodustavad kolm perekonda, mis algavad järgmiste tuumadega: U_{92}^{238} , Th_{90}^{232} , Ac_{89}^{235} . Kõik perekonnad lõpevad Pb_{82} ühe stabiilse isotoobiga.

Radioaktiivse lagunemise seadus

Radioaktiivne lagunemine on statistiline nähtus. Sama aine konkreetsed tuumad võivad laguneda väga erineva aja jooksul. Seetõttu on mõtet rääkida suure arvu tuumade keskmisest elueast.

Radioaktiivne lagunemine allub eksponentsiaalsele seaduspärasusele:

$$N = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (692)$$

kus N on ajahetkel t olemasolevate tuumade arv;

N_0 - tuumade arv ajahetkel $t = 0$;

λ - antud ainele iseloomulik suurus - radioaktiivse lagunemise konstant.

Selgitame λ mõtte. Ajahüliku jooksul lagunevate tuumade arv:

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N_0 e^{-\lambda t} = -\lambda N, \quad (693)$$

kust

$$\lambda = -\frac{1}{N} \frac{dN}{dt} \quad (694)$$

Seega radioaktiivse lagunemise konstant näitab, milline osa tuumadest laguneb ajaühiku jooksul. Teisiti: λ võrdub tõenäosusega, et tuum laguneks ajaühiku jooksul.

Ajavahemikku, mille jooksul lagunevad pooled antud aine tuumad, nimetatakse poolestusajaks. Poolestusaja võime määrata tingimusest

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\lambda T},$$

kust

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0,693}{\lambda} \quad (695)$$

Teadaolevate radioaktiivsete tuumade poolestusajad on vahemikus $3 \cdot 10^{-7}$ s ... $5 \cdot 10^{15}$ a.

Keskmine eluiga

$$\tau = \frac{1}{\lambda} = \frac{T}{\ln 2} = \frac{T}{0,693} \quad (696)$$

Nuklonite arv tuumas ja tuuma stabiilsus

Radioaktiivsed tuumad on mittestabiilsed seetõttu, et neutronite ja prootonite arv tuumas ei vasta tasakaalulisele. Niisugusel tuumal on "kasulik" muuta oma koostist, kuna sel juhul vabaneb energiat, tuuma energia väheneb. Tuleb eristada mittestabiilset tuuma ja ergastatud tuuma. Mittestabiilne tuum võib olla nii ergastatud kui ergastamata (põhi-)olekus. Kui mittestabiilne tuum on ergastamata olekus, siis tema energia antud koostise juures on minimaalne. Ergastatud ja ergastamata olekus võivad olla nii stabiilsed kui mittestabiilsed tuumad.

Ligikaudne teooria näitab, et neutronite ja prootonite arv stabiilses tuumas N_{st} ja Z_{st} allub seaduspärasusele:

$$\frac{N_{st}}{Z_{st}} = 0,98 + 0,015 A^{2/3}. \quad (697)$$

Seos on saadud tuuma koguenergia minimumi tingimusest. Üldiselt on seos (697) küllalt hästi täidetud, Igatahes ei erine stabiilsetel tuumadel $\frac{N_{st}}{Z_{st}}$ palju (697) põhjal arvutust.

α -lagunemine

α -lagunemisel väljastab tuum He aatomi tuuma He_2^4 , seega tema laeng väheneb kahe võrra (tuum nihkub Mendelejevi tabelis kahe koha võrra ettepoole), massiarv - nelja võrra.

Konkreetsed tuumad väljastavad reeglina kindla energiaga α -osakesi. Täpsemad mõõtmised on aga näidanud, et ühe isotoobi tuumad väljastavad veidi erineva, kuid siiski diskreetse energiaga α -osakesi. α -osakeste diskreetne energiaspekter näitab, et tuumal on diskreetsed energiatasemed.

α -osakeste väljumine tuumast on seotud kuloonilistest jõududest tingitud potentsiaali barjääri ületamisega. Katsete näitavad, et α -osakese kineetiline energia on alati väiksem potentsiaali barjääri maksimaalsest kõrgusest:

$$E_0 = \frac{2Ze^2}{r}, \quad (698)$$

kus r on tuuma raadius, kaugus (tuuma keskpunktist), millest alates mõjuvad tuumajõud;

$2e$ - α -osakese laeng.

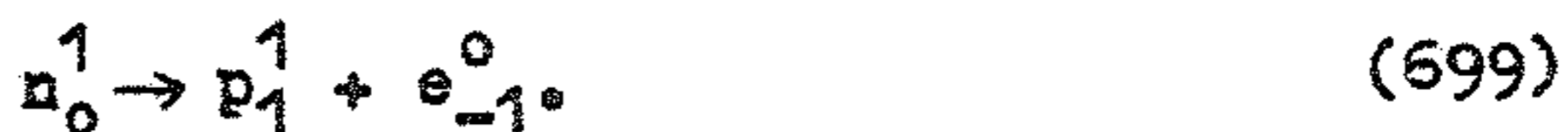
Seega α -lagunemine on võimalik ainult tunneliefekti tõttu. α -lagunemise seaduspärasused on heas kooskõlas tunneliefekti teooriaga. Kooskõlas valemiga (514) on barjääri läbimise tõenäosus seda suurem (poolestusaeg seda väiksem), mida suurem on α -osakese kineetiline energia ja mida madalam on potentsiaali barjäär.

β^- -lagunemine, Neutriino

β^- -lagunemisel kiirgab tuum elektroni. Kunstlikult on võimalik tekitada ka β^+ -radioaktiivsust. Sel juhul kiirgab tuum elektroni nn. antiosakese - positroni.

β^- -lagunemise korral ei muutu nuklonite koguarv

tuumas, prootonite arv aga kasvab ühe võrra ning neutronite arv väheneb ühe võrra. Seega muundub üks neutron prootoniks:



Kuid elektroni teke ei saa olla selle protsessi ain-
saks tulemuseks. Selleks on kolm põhjust.

1. Protsess (699) on vastulus impulsimomendi jäävuse seadusega. Nii neutroni, prootoni kui elektroni spinn on $1/2$. Et avaldises (699) paremal pool saaksime spinnide summaks $1/2$, peab tekkima veel üks poolearvulise spinniga osake.

2. Protsess (699) on vastuolus energia jäävuse seadusega. Asi on selles, et β -elektronide spekter (erinevalt α -osakeste spektrist) pole diskreetne, vaid pidev. Elektronide suhtelise arvu sõltuvus nende energiast on pidev ning sujuv kõver, mis muutub nulliks E väärtuste juures 0 ning E_{\max} (antud aine jaoks kindel suurus) ja omab maksimumi E väärtuse juures $E < \frac{E_{\max}}{2}$. Kindlate tuumade β^- -lagunemisel aga vabaneb kindel energia E_0 , mis võrdub ematuuma ja tütar-
tuuma seisumasside vahega, korrutatud c^2 -ga. Kui elektron saaks kogu vabaneva energia, peaks tema kineetiline energia võrduma $E_{\max} = E_0 - m_0 c^2$ (m_0 - elektroni seisumass). Seega peaks elektronide kineetiline energia antud tuumade lagunemisel olema kindel suurus. Kuna ta seda pole (on sellest väiksem), peab energia ülejäägi saama mingi teine osake.

3. Protsess (699) on vastuolus nn. leptonlaengu jäävuse seadusega (lähemalt tuleb sellest juttu edaspidi). Protsessis osalevatest osakestest omab leptonlaengut (+1) ainult elektron. Leptonlaengu jäävus nõuab, et tekiks osake leptonlaenguga -1.

Niiuguse osakese olemasolu ennustas Pauli 1931. a. Teda nimetati neutrinoks. Neutriino on laenguta osake, tema spinn on $1/2$, seisumass väga väike (või 0). Neutriino vastasmõjustub ainega äärmiselt nõrgalt, ta ei võta osa ei elektromagnetilisest ega tugevast vastasmõjust, võtab osa ainult nn. nõrgast vastasmõjust, mille intensiivsus on tunduvalt

väiksem nii tugeva kui elektromagnetilise vastasmõju intensiivsusest. Näiteks läbib neutriino maakera praktiliselt takistamatult. Seetõttu õnnestus neutriino olemasolu katseliselt tõestada alles 1956. a.

Seega toimub β^- -lagunemine järgmise skeemi kohaselt:



kus $\tilde{\nu}$ on nn. antineutriino. Antineutriino on neutriino antiosake. Antineutriino leptonlaeng on -1 (neutriinol $+1$).

β^- -lagunemisel jaguneb kogu vabanev energia E_{\max} elektroni ja antineutriino vahel statistiliselt, keskmiselt saab antineutriino energia $0,7 E_{\max}$.

Kuna β^- -lagunemine toimub nõrga vastasmõju toimel, siis on β -aktiivsete tuumade poolestusajad suhteliselt pikad (protsess toimub seda kiiremini, mida tugevamale vastasmõjule ta allub).

Protsess (700) võib toimuda ka vaba neutroniga. Kuna $m_n > m_p$, siis on see energeetiliselt võimalik. Seetõttu ongi neutron mittestabiilne osake.

γ -kiired

Looduslike radioaktiivsete ainete hulgas pole ühtki sellist, mis väljastaks ainult γ -kiiri, γ -kiired aga kaasnevad sageli α - või β -lagunemisega. Seejuures väljastab γ -kvante tütartuum (mitte ematum). γ -spekter on diskreetne, s.t. iga tuum väljastab vaid kindla energiaga γ -kvante. γ -kvandi välja kiiranud tuuma energia väheneb. Järelikult oli radioaktiivsel lagunemisel tekkinud tuum enne γ -kvandi kiirgamist ergastatud olekus. γ -spektri diskreetisusest järeldub, et ka tuuma energia on diskreetne. γ -kvanti energia on suur (mõni MeV), järelikult on vahekaugus tuuma energiatasemete vahel märksa suurem aatomi energiatasemete vahekaugusest.

Tuuma ergastatud oleku eluiga on $10^{-13} \dots 10^{-14}$ s (aatomil $\sim 10^{-8}$ s). Selle aja vältel läheb tuum põhiolekusse. Seejuures võib tuum minna põhiolekusse rea vahepealsete

olekute kaudu, mille tõttu antud tuuma kiirgus võib koosne-
da mitmesuguse (kuid diskreetse) energiaga kvantidest. Ainult
mõningatel juhtudel võib tuuma ergastatud oleku eluiga olla
märksa suurem (isegi kuni mõni aasta). Selliseid ergastatud
tuumi nimetatakse isomeerideks.

γ -kiirgus on väga lühilaineline elektromagnetkiirgus.
Seetõttu ilmnevad tema laineomadused nõrgalt ning kiirgus
käitub peamiselt osakeste - γ -kvantide - voona.

Ergastatud tuum võib oma lisaenergia ära anda mitte
ainult γ -kvandi näol. Ta võib selle anda vahetult aatomi
ühe sisekatte elektronile, mille tulemusena elektron lahkub
aatomist. Niiugust nähtust nimetatakse sisekonversiooniks.
Tekkinud vakantse koha täidab elektron mõnest välimisest kat-
test. Seetõttu kaasneb sisekonversiooniga alati karakterist-
lik röntgenikiirgus.

TUUMAREAKTSIOONID

Tuumareaktsiooni mõiste

Tuumareaktsioon on tuuma muundumine tema vastasmõjul
teiste tuumade või osakestega.

Kõige levinumaks tuumareaktsiooniks on reaktsioon, mil-
les osakese a ja tuuma X vastasmõjul tekib uus tuum Y ja osa-
ke b :



Sageli tähistatakse sellist reaktsiooni lühidalt:



kus a on reaktsiooni esile kutsunud osake;

b - reaktsioonil tekkinud osake.

Mõnikord lühendatakse seda kirjutusviisi veelgi:



Kõigil tuumareaktsioonidel kehtib laengu, massi (massi-
arvu), energia, impulsi ja impulsimomendi jäävuse seadus.

Kui reaktsiooni esilekutsunud osake a on identne reakt-
sioonil tekkinud osakesega b ($a \equiv b$), siis nimetatakse prot-

sessi (701) hajutamiseks. Kui sel juhul osakese b energia võrdub osakese a energiaga ($E_b = E_a$), siis nimetatakse hajutamist elastseks, vastupidisel juhul ($E_b \neq E_a$) - mitteelastseks.

Karakteristlik tuumaaeg

Karakteristlikuks tuumajaks nimetatakse ajavahemikku, mille jooksul osake läbib tuuma läbimõõduga võrdse teepikkuse.

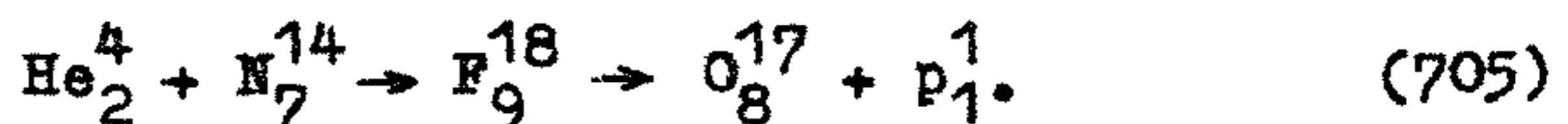
Nukloni jaoks energiaga 1 MeV on karakteristlik tuumaaeg suurusjärgus 10^{-22} s.

Liit-tuum

Iga tuumareaktsioon, mis toimub aja jooksul, mis määratavalt ületab tuumaja, toimub kahes etapis. Esimeses etapis haarab tuum X osakese a ja moodustub vahepealne tuum - liit-tuum. Seejärel liit-tuum laguneb, kiirates välja osakese b:



kus C on liit-tuum. Sellise reaktsiooni näiteks on järgmine reaktsioon:



See on ühtlasi esimene laboratooriumis läbiviidud tuumareaktsioon (Rutherford, 1919). Pommitavateks osakesteks olid looduslikul radioaktiivsusel tekkivad α -osakesed.

Esimene laboratooriumis kiirendatud osakeste mõjul toimunud reaktsioon (Cockcroft, Walton, 1932):



Võrreldes tuumajaga on liit-tuuma eluiga suur. Seetõttu jõuab liit-tuum "unustada", kuidas ta tekkis ning liit-tuuma lagunemine ei sõltu sellest, kuidas ta tekkis.

Tuuma tunginud osakese energia jaguneb nuklonite vahel kiiresti. Liit-tuum on ergastatud olekus. Sellisesse

olekusse jääb tuum nii kauaks, kuni sisemiste fluktuatsioonide tõttu üks osake (mis võib koosneda ka mitmest nuklonist) saab tuumast väljumiseks piisava energia. Tuum võib energia ülejäägi ära anda ka γ -kvandi näol (kiirguslik haare).

Otsesed tuumareaktsioonid

Kui tuuma tungiva osakese ja tuuma vastasmõju toimub tuumajõudude vahendusel ja osakese energia on suur (kümned MeV-d) siis toimub reeglina nn. otsene tuumareaktsioon. Sel juhul liit-tuum ei teki. Tuum tunginud osake annab oma energia vahetult mõnele osakesele (nuklonile, α -osakesele jne.), mille tagajärjel see väljub tuumast.

Tuumareaktsioonid neutronite toimel

Erinevalt laetud osakestest ei allu neutronid kuloonilisele tõukumisele, mistõttu ka küllalt väikese energiaga neutronid võivad tungida tuuma. Sellised tuuma tunginud neutronid võivad tuumas esile kutsuda mitmesuguseid muundusi. Eriti suur on tõenäosus neutroni haaramiseks tuuma poolt nn. soojuslike neutronite korral. Soojuslikeks neutroniteks nimetatakse selliseid, mille energia on samas suurusjärgus aatomite soojusliikumise energiaga (kuni mõni kümnendik eV). Neutroneid võib aeglustada, lastes neid läbi aine, mis sisaldab vesinikku (parafiin, vesi). Sel juhul kaotab neutron energiat elastsetel põrgetel vesiniku tuumadega - prootonitega, kuni ta muutub soojuslikuks.

Aeglase neutroni tuuma tungimise tõenäosus on tavaliselt pöördvõrdeline neutroni kiirusega, mis on seletatav sellega, et aeglasemalt liikuv neutron viibib kauem tuumajõudude mõju all. Sageli omab neutroni haaramise tõenäosus teatava energia juures teravat maksimumi. Niisugust nähtust nimetatakse resonantshaardeks. Resonantshaare on seletatav sellega, et tuuma energia on diskreetne. Kui neutroni tuuma tungimisel tekkinud liit-tuum energia võrdub ühe selle tuuma lubatud energiaga, siis neutroni haaramise tõenäosus kasvab järsult.

Aeglaste neutronite toimel toimub peamiselt elastne

hajutamine (n,n) ja kiirguslik haare (n, γ), mõningatel kergetel tuumadel võivad toimuda ka reaktsioonid (n,p) ja (n, α)

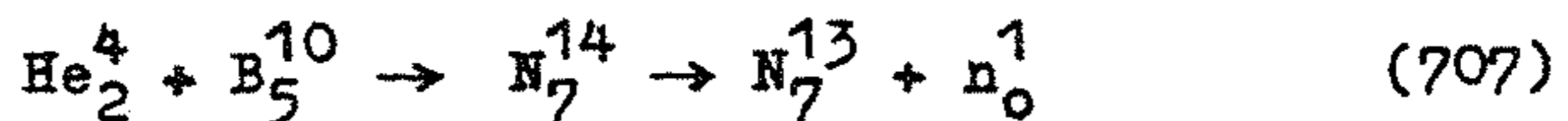
β^+ -radioaktiivsus

Nagu eespool nägime, omab stabiilsetes (mitteradioaktiivsetes) tuumades neutronite ja prootonite arvu suhe kindlat väärtust $\frac{N_{st}}{Z_{st}}$ (697). Looduslikel β^- -radioaktiivsetel tuumadel on neutroneid rohkem, $\frac{N}{Z} > \frac{N_{st}}{Z_{st}}$, seetõttu muundubki niisugustes tuumades neutron prootoniks, mistõttu tuuma energia väheneb. Seejuures esineb looduslik β^- -radioaktiivsus rasketel tuumadel.

Tuumareaktsioonide abil võib ka stabiilseid tuumi (ka kergemaid) muuta β^- -radioaktiivseteks, muutes neutronite ja prootonite arvu suhet neis.

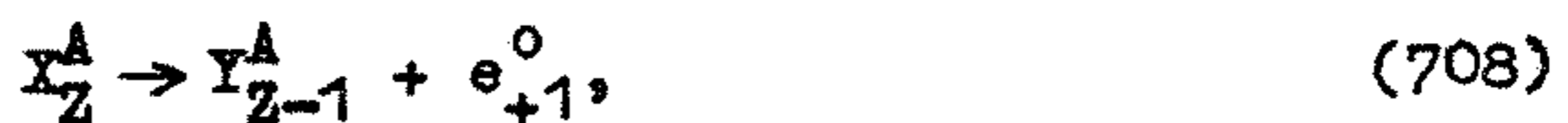
Kunstliku β^- -radioaktiivsuse avastasid M. Curie ja F. Joliot-Curie 1934. a. Stabiilseid tuumi pommitati α -osakestega. Reaktsioonid B, Al ja Mg tuumadega viisid nn.

β^+ -radioaktiivsuse avastamiseni. Näiteks reaktsioonil



tekkival tuumal on $\frac{N}{Z} < \frac{N_{st}}{Z_{st}}$. Niisuguses tuumas muundub

prooton neutroniks. Vaba prootoni muundumine neutroniks on võimatu, kuna $m_p < m_n$. Kuid tuumas osutub niisugune muundumine energeetiliselt kasulikuks, s.t. niisugusel muundumisel tuuma energia väheneb. β^+ -lagunemine toimub skeemi järgi:



kus e_{+1}^0 on elektroni antiosake -positron, millel on täpselt samasugune mass kui elektronil, kuid laeng on +e. Samadel põhjustel, mida käsitlesime seoses β^- -lagunemisega, peab lisaks positronile tekkima neutriino (leptonlaengu jäävuse põhjal seekord mitte antineutriino, vaid neutriino; positro-

ni leptonlaeng on -1). Seega toimub β^+ -lagunemisel tuumas muundumine:



K-haare

Paljudes tuumades, mille $\frac{N}{Z} < \frac{N_{st}}{Z_{st}}$, võib prootoni muun-

dumine neutroniks toimuda sel teel, et tuum haarab elektrooni ühelt sisekatetest (K, L jne.):



Niisugust protsessi nimetatakse K-haardeks. K-haare esineb näiteks tuumal Be_4^7 . Sel juhul toimub tuumas muundumine



K-haare on β -lagunemise kolmas liik. Erinevalt β^\pm -lagunemisest väljub K-haardel tuumast ainult neutriino, mis viib ära kogu vabaneva energia.

Tuumade jagunemine

1938. a. avastasid Hahn ja Strassmann, et uraani kiiritamisel neutronitega tekkisid kergemad elemendid Ba ja La. Sel juhul jaguneb neutroni haaranud raske tuum kaheks (vahel ka enamaks) kergemaks peaaegu võrdse massiga tuumaks - kiluks. Kuna kergemate tuumade eriseoseenergia on suurem kui raskematel, vabaneb niisugusel jagunemisel suur energia - ligikaudu 200 MeV, peamiselt on see kildude kineetiline energia. Peale selle tekib niisugusel jagunemisel 2-3 uut neutronit (sekundaarsed neutronid). Asi on selles, et rasketes tuumades on neutronite suhteline arv suurem kui kergetes, seetõttu on killud "üle koormatud" neutronitega, mistõttu nad kiirgavad neutroneid. Suurem osa neutroneid eraldub praktiliselt silmapilkselt (ajavahemiku $< 10^{-14}$ s jooksul), osa neutroneid ($\sim 0,75$ %) aga eraldub kildudest märgatava hilineemisega (kuni 1 min.). Neid nimetatakse hilinevateks neut-

roniteks. Peale selle vabanevad killud neutronite ülejäägist β^- -lagunemise teel.

Jagunemise tõenäosus sõltub neutronite energiast. Neutronite, mille energia ületab 100 MeV, toimel jagunevad kõik tuumad. Neutronite, mille energia on mõni MeV, toimel jagunevad tuumad massiarvuga ≥ 210 . Neutronite, mille energia on ~ 1 MeV, toimel jagunevad tuumad U_{92}^{238} , Th_{90}^{232} , Pa_{91}^{231} , Pu_{94}^{239} . Soojuslike neutronite toimel jagunevad suure tõenäosusega U_{92}^{235} , Pu_{94}^{239} , U_{92}^{233} , Th_{90}^{230} (kahte viimast looduses pole).

Raskete tuumade jagunemine on küllalt hästi seletatav nn. tuuma tilgamudeli abil. Tuuma vaadeldakse elektriliselt laetud kokkusurumatu vedeliku tilgana. Tuuma sattunud neutroni energia jaotub nuklonite vahel, kutsudes esile nende soojusvõnkumise intensiivsuse kasvu, mistõttu tuum jagunebki.

Jagunemise ahelreaktsioon

Raskete tuumade jagunemine neutronite toimel ja uute neutronite teke võimaldab seda reaktsiooni läbi viia ahelreaktsioonina. Ahelreaktsiooniks nimetatakse reaktsiooni, mille produktid võivad uuesti astuda reaktsiooni lähteainega.

Ahelreaktsiooni oluliseks karakteristikuks on neutronite paljunemise kordaja k , mis võrdub antud põlvkonna neutronite arvu ja eelneva põlvkonna neutronite arvu suhtega. Ahelreaktsioon võib tekkida ainult tingimusel $k \geq 1$. Kui $k < 1$, siis reaktsioon mõninga aja pärast kustub; kui $k = 1$, siis toimub reaktsioon jääva kiirusega; kui $k > 1$, toimub järjest kiirenev reaktsioon.

Tuumakütusena on kasutatavad isotoobid U_{92}^{235} , Pu_{94}^{239} (esineb looduses tühisel hulgal), U_{92}^{233} (looduses ei esine).

Vaatame esialgu ahelreaktsiooni ideaalset skeemi. Oletame, et iga jagunemisel tekkinud neutron satub uuesti tuuma ja kutsub seal esile uue jagunemise. Sel juhul kasvaks jagunemiste ja neutronite arv laviinitaoliselt ja tegemist

oleks kiireneva ahelreaktsiooniga. Reaktsiooni alustamiseks piisab ühest neutronist. Selline neutron võib leiduda kosmilises kiirguses või tekkida U_{92}^{235} spontaansel jagunemisel (avastatud 1940; Flerov, Petržak).

Tegelikult ei kutsu kaugeltki kõik sekundaarsed neutronid esile uusi jagunemisi. 1. Nn. aktiivse tsooni (ruum, kus toimub reaktsioon) lõplike mõõtmete ja neutronite suure läbitungimisvõime tõttu lahkub osa neist aktiivsest tsoonist enne, kui neid haarab tuum. 2. Osa neutroneid haaratakse mittejagunevate tuumade poolt, mida alati leidub aktiivtsoonis. 3. Mitte kõik tuuma sattunud neutronid ei kutsu esile jagunemist. Konkureerivad protsessid on mitteelastne hajutamine ja kiirguslik haare.

Paljunemise kordaja sõltub jagunevast ainest, selle aine hulgast, aktiivtsooni mõõtmetest ja kujust. Aktiivtsooni minimaalseid mõõtmeid, mille juures on võimalik ahelreaktsioon, nimetatakse kriitilisteks mõõtmeteks. Jaguneva aine minimaalset massi, mis on vajalik ahelreaktsiooni läbiviimiseks, nimetatakse kriitiliseks massiks.

Looduslik uraan sisaldab 99,27 % isotoopi U^{238} ja 0,72 % U^{235} . U^{235} jagunemisel tekivad neutronid energiaga 0 ... 7 MeV (keskmise energia 2 MeV). Sellise energiaga neutronid praktiliselt ei kutsu esile U^{238} jagunemist. Seetõttu looduslikus uraanis ahelreaktsiooni ei teki. U^{235} eraldamine looduslikust uraanist on väga keerukas protsess.

Ahelreaktsiooni võib läbi viia juhitavana või mittejuhitavana. Juhitava ahelreaktsiooni korral on võimalik neutronite paljunemise kordajat k muuta, mittejuhitava reaktsiooni korral mitte.

Mittejuhitav reaktsioon on aatomipommi plahvatus. Aatomipommis kasutatakse kütusena puhast (või peaaegu puhast) U^{235} (või Pu^{239}). Sellise pommi tuumalaeng kujutab endast kahte või enam U või Pu tükki, mille massid on alla kriitilise. Et pomm plahvataks, viiakse tuumalaengud tavalise lõhkeaine plahvatuse abil kokku. Nüüd ületab tuumalaengu mass kriitilise, toimub mittejuhitav ahelreaktsioon, mille korral väga lühikese aja jooksul vabaneb tohutu energia.

Tuumareaktor

Tuumareaktor on seade, milles toimub juhitud ahelreaktsioon. Näitena vaatame soojuslikel neutronitel töötavat reaktorit. Tuumakütusena kasutatakse kas looduslikku või isotoobiga U^{235} rikastatud uraani. U^{235} jagunemise tõenäosus soojuslike neutronite toimel on suur. Neutronite aeglustamiseks kasutatakse elastseid põrkeid tuumadega. Elastsel põrkel äraantav energia on suurim juhul, kui põrkuvate osakeste massid on võrdsed. Seetõttu oleks ideaalseks aeglustiks vesinikku sisaldav aine, näiteks vesi. Kuid tavaline vesi ei kõlba aeglustiks, kuna ta lisaks elastsetele põrgetele haarab intensiivselt neutroneid. Head aeglustid on raske vesiniku (deuteerium D_1^2), süsiniku ja berülliumi tuumad.

Reaktori aktiivtsoonis paiknevad vaheldumisi aeglusti (näit. grafiidi) ja suhteliselt õhukesed uraani plokid. See on vajalik selleks, et vältida U^{235} jagunemisel tekkivate neutronite kiirguslikku haaret U^{238} tuumade poolt. Enamik jagunemisel tekkinud neutroneid jõuab enne haaramist (eriti "ohtlik" on energia 7 eV, sellel energial toimub resonants-haare) aeglustisse, sealt aga väljuvad soojuslikud neutronid, mida U^{238} ei haara. Reaktori aktiivtsoon on ümbritsetud neutroneid peegeldava ainega.

Reaktsiooni juhtimiseks kasutatakse intensiivselt neutroneid neelavast ainest (B, Cd) valmistatud vardaid, mille sügavust on võimalik muuta. Reaktsiooni juhtimine on võimalik ainult tänu hilinevatele neutronitele (neid on $0,75\% \approx 1\%$). Hilinevate neutronite tõttu võime neutronite paljunemise kordaja k tõsta üle 1 (kuid mitte üle 1,01, siis toimuks plahvatus). Sel juhul reaktori võimsus kasvab. Kui võimsus on saavutanud ettenähtud väärtuse, langetatakse vardad sellisele sügavusele, et $k=1$. Edasi töötab reaktor jääva võimsusega.

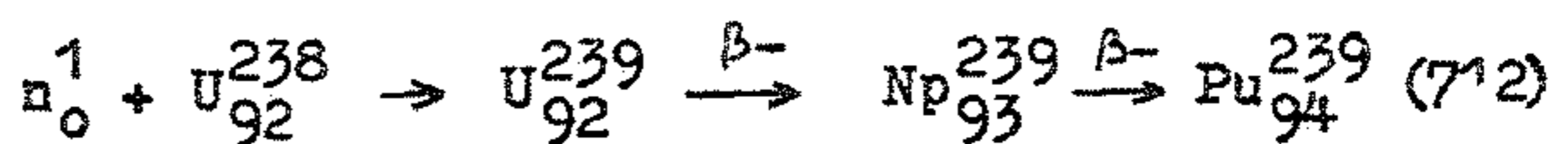
Kirjeldatud reaktorit, milles tuumakütus ja aeglusti on teineteisest eraldatud, nimetatakse heterogeenseks. Homogeenses reaktoris moodustavad kütus ja aeglusti ühtlase segu (näit. U^{235} või Pu^{239} soolad on lahustatud raskes vees).

Reaktori aktiivtsoon kuumeneb tugevasti. Soojuse ära-

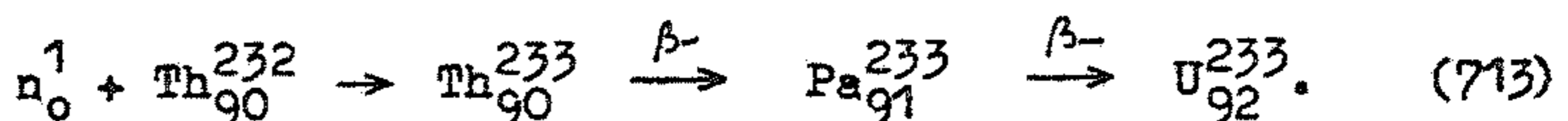
juhtimiseks reaktorist kasutatakse soojuskandjat (vett või madala sulamistemperatuuriga leelismetalle). Soojuskandja siiseenergiat ei saa otseselt kasutada, kuna soojuskandja on olnud aktiivtsoonis ja on seetõttu radioaktiivne. Soojuskandja annab soojusvaletis soojust veele, muutes selle auruks, mida võib kasutada energeetilistel eesmärkidel (näiteks auruturbiini tööks, mis omakorda paneb tööle voolugeneraatori).

Tuumaeenergiat hakati rahuotstarbeliselt esimesena kasutama meie maal. I. Kurtsatovi juhtimisel anti 1954. a. eksploatatsiooni esimene aatomielektrijaam võimsusega 5 MW. Tuumaeenergia osatähtsus energeetikas kasvab pidevalt. Tal on tähtis koht tulevikuenergeetikas.

Eriti perspektiivikad on isotoopidega U^{235} või Pu^{239} rikastatud kiiretel neutronitel töötavad reaktorid. Osa neutroneist võib sellistes reaktorites kasutada uue tuumakütuse Pu^{239} tootmiseks reaktsioonis



või U^{233} tootmiseks reaktsioonis



Seejuures võib uut tuumakütust tekkida rohkem, kui seda kuulub reaktori tööks. Selliseid reaktoreid nimetatakse paljundusreaktoriteks. Esimene selline katselis-tööstuslik reaktor meie maal juba töötab (350 MW).

Termotuumareaktsioon

Kergeste tuumade ühinemisel raskemateks vabaneb samuti energiat. Kuna eriseoseenergia üleminekul kõige kergematelt tuumadelt raskematele kasvab väga järsult, siis vabaneb niisugusel sünteesil märgatavalt rohkem energiat (ühe nukloni kohta) kui raskete tuumade jagunemisel. Tuumade ühinemisel on neil vaja ületada kulooniliste tõukejõudude potentsiaali barjäär. Kõige kergemate tuumade ($Z=1$) korral on see $\frac{e^2}{r} \approx$

$\approx 0,7$ MeV (r on tuumajõudude mõjurasadius). Kui ühinemine

toimub soojusliikumise energia arvel ($3/2 kT$ kummalgi tuumal), peaks temperatuur olema $2,6 \cdot 10^9$ K. Kuid ühinemine võib toimuda ka märksa madalamal temperatuuril (10^7 K), sest 1) üksikutel tuumadel võib olla keskmisest märgatavalt kõrgem energia (kehtib Maxwelli jaotus), 2) ühinemine võib toimuda tunneliefekti tõttu.

Kergeste tuumade ühinemise reaktsiooni, mis toimub ülikõrgetel temperatuuridel (10^7 K ja enam), nimetatakse termotuumareaktsiooniks.

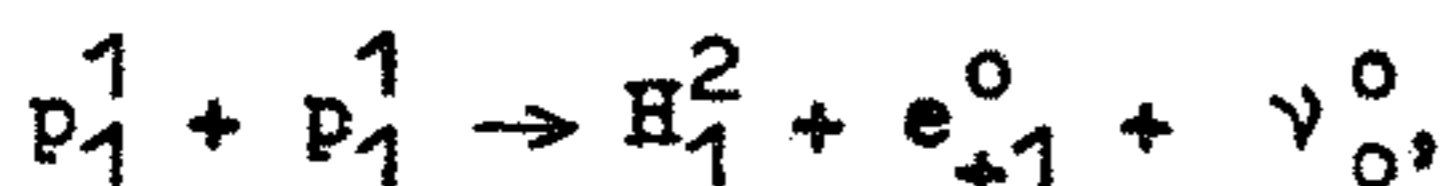
Niisuguse reaktsiooni näiteks võib olla deuteeriumi- ja triitiumituumade (üliraske vesinik) ühinemine, mis toimub vesinikupommi plahvatusel.



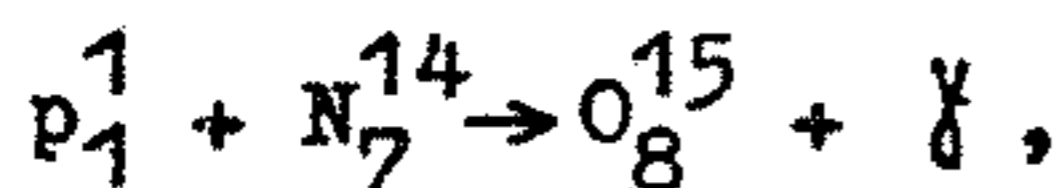
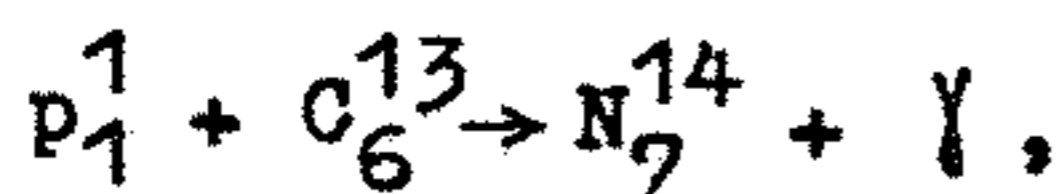
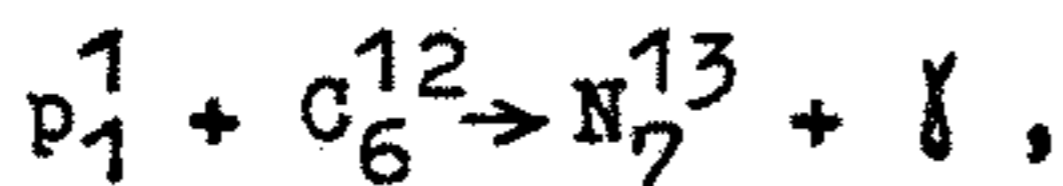
Reaktsiooniks vajalik temperatuur luuakse aatomipommi plahvatusel. Seega vesinikupommi süttikuks on aatomipomm. Sellel reaktsioonil vabaneb energia $\sim 3,5$ MeV nukloni kohta (uraani jagunemisel 0,85 MeV).

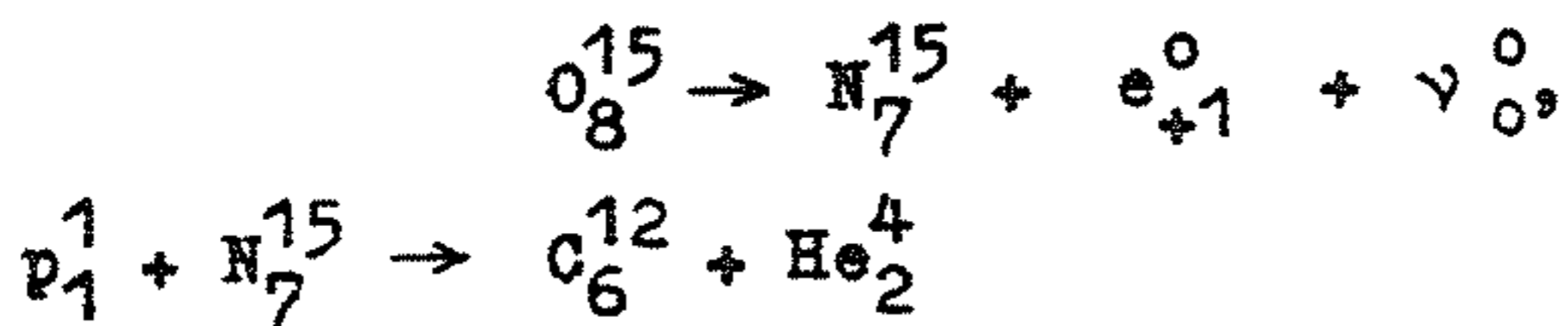
Termotuumareaktsioonid on Päikese ja teiste tähtede energiaallikaks. Võimalikud on järgmised tsükklid.

1. Protoni-protoni tsükkel, mis toimub temperatuuril $\sim 10^7$ K.



2. Süsinikutsükkel ($\sim 2 \cdot 10^7$ K).





Reaktsiooni tulemuseks on nelja prootoni ühinemine He tuumaks, vabaneb energia 26,7 MeV. Süsinikutuumade arv ei muutu, nad võtavad reaktsioonist osa katalüsaatoritena.

Juhitava termotuumareaktsiooni teostamiseks on vaja tekitada ja hoida teatud ruumalas temperatuuri $\sim 10^8$ K. Sellisel temperatuuril on aine täielikult ioniseeritud plasma. Nii kõrge temperatuuri saavutamine ja aine hoidmine sellel temperatuuril on äärmiselt keerukas probleem. Praegu ollakse veendunud, et plasma hoidmiseks tuleb kasutada eri kujuga tugevaid magnetvälju. On saavutatud temperatuur $7 \dots 8 \cdot 10^6$ K, mille juures hoiti plasmad tihedusega 10^{14} os./cm³ ruumalas 5 m³ 1 s jooksul.

Juhitava termotuumareaktsiooni teostamine annaks praktiliselt piiramatu energiaallika.

ELEMENTAAROSAKESED

Elementaarosakese mõistest

Kujutlus elementaarosakestest tekkis seoses materia diskreetse ehituse avastamisega. Selle kujutluse järgi ei saa materiat piiramatult jaotada, on olemas materia mikrokoopilised annused, mis ei ole enam jaotatavad. Neid väga väikeseid materia koostisosi hakatigi nimetama elementaarosakesteks.

Praeguseks on enamikul osakestest, mida suhteliselt hiljuti peeti elementaarseteks, avastatud sisemine struktuur. Vaatamata sellele säilis nende osakeste jaoks nimetus elementaarosake. Loomulikult muutus selle mõiste sisu. Seetõttu võiks antud etapil nimetada elementaarosakesteks kõiki mikroosakesi, mis erinevad aatomitest ja aatomituumadest.

Neid osakesi, millel kaasaegsete kujutluste põhjal puudub sisemine struktuur, on hakatud nimetama fundamentaals-

seteks e. tõeliselt elementaarseteks (leptonid, kvargid).

Praeguseks avastatud elementaarosakeste arv on väga suur - mitusada. Neist enamik on äärmiselt ebastabiilsed (eluga $10^{-22} \dots 10^{-24}$ s). Neid nimetatakse resonantsideks. Resonantse võib vaadata elementaarosakeste ergastatud olekutena.

Vastasmõjude liigid

Looduses on olemas neli fundamentaalset vastasmõju liiki: tugev, elektromagnetiline, nõrk, gravitatsiooniline. Vastasmõjud erinevad nende protsesside intensiivsuse poolest, mida nad esile kutsuvad. Tabelis on toodud vastasmõjude intensiivsused suhtelistes ühikutes, kusjuures ühikuks on võetud tugeva vastasmõju intensiivsus, samuti vastasmõjude mõjuraadiused.

Vastasmõju	Intensiivsus	Mõjuraadius, cm
Tugev	1	10^{-13}
Elektromagnetiline	10^{-2}	∞
Nõrk	10^{-14}	10^{-15}
Gravitatsiooniline	10^{-39}	∞

Tugev vastasmõju

Tugevas vastasmõjus osalevad väga paljud osakesed. Tuumajõud on vaid tugeva vastasmõju üks ilminguid. Tugeva vastasmõju tõttu tekivad suure energiaga osakeste põrkel paljud uued osakesed. Osakesi, mis osalevad tugevas vastasmõjus, nimetatakse hadroniteks.

Vaatamata tugeva vastasmõju suurele intensiivsusele, on tema toime piiratud, seda kolmel põhjusel: 1) mitte kõik osakesed ei osale tugevas vastasmõjus (näit. foton ja elektron), tugev vastasmõju pole universaalne; 2) tugeva vastasmõju mõjuraadius on väga väike, kaugustel üle 10^{-13} cm tugev vastasmõju lakkab; 3) tugevale vastasmõjule on iseloomulik

kõige kõrgem sümmeetria, mille tõttu tugeva vastasmõju protsessides kehtib kõige rohkem jäävusseadusi; iga jäävusseadus tingib aga teatud piiranguid protsessidele.

Elektromagnetiline vastasmõju

Elektromagnetiline vastasmõju teostub elektromagnetilise välja kaudu. Kuigi elektromagnetiline vastasmõju on nõrgem tugevast, osutub ta paljudes protsessides oma suure mõjuraadiuse tõttu määravamaks. Selle vastasmõjuga on seotud kõik elektrilised ja magnetilised nähtused, samuti optilised, soojuslikud, keemilised ja paljud mehaanilised nähtused. Selles vastasmõjus osalevad kõik osakesed (nii laetud kui neutraalsed) peale neutriino.

Nõrk vastasmõju

Nõrk vastasmõju on kõigil kaugustel võrreldamatult nõrgem elektromagnetilisest ja tugevast vastasmõjust. Kuid nõrgas vastasmõjus osalevad kõik osakesed peale footoni. Seetõttu on nõrk vastasmõju universaalne.

Nõrga vastasmõju kvandid nn. vahebosonid W^{\pm} ja Z^0 avastati 1982.-1983. a.

Gravitatsiooniline vastasmõju

Gravitatsiooniline vastasmõju on kõige nõrgem vastasmõju. Kuna gravitatsioonilises vastasmõjus osalevad eranditult kõik osakesed, on ta absoluutselt universaalne vastasmõju. Elementaarosakeste puhul ei oma gravitatsioonijõud praktiliselt mingit tähtsust. Seetõttu me järgnevas seda vastasmõju ei arvesta.

Stabiilsed ja mittestabiilsed osakesed

Kõigi vastasmõjude ühiseks omaduseks on nende võime esile kutsuda osakeste lagunemisi. Kõigi tuntud osakeste hulgas on ainult 11 stabiilset: footon; elektron, prooton ning 3 neutriinot koos oma antiosakestega. Kõik teised osakesed on kas mittestabiilsed või kujutavad endast resonantse. Mittestabiilsed osakesed erinevad resonantsidest selle poolest, et nende eluiga ületab tunduvalt nn. tugeva vastasmõju ka-

rakteristliku aja ($\tau \approx r/c$; r - tugeva vastasmõju mõjuradius). Resonantside keskmine eluiga on selle ajavahemikuga võrreldav. Resonantside lagunevad ainult tugeva vastasmõju toimel. Osakese eluiga on seda lühem, mida tugevama vastasmõju toimel ta laguneb.

Antiosakesed

Antiosakeste olemasolu on elementaarosakeste universaalne omadus. Elektroni antiosakese - positroni - olemasolu ennustas Dirac 1928. a. (1932. a. avastati ta kosmilises kiirguses). Diraci võrrandi (relativistliku Schrödingeri võrrandi) lahendamisel vaba elektroni jaoks saadi tema energia jaoks $E = \pm \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}$ ($\beta = \frac{v}{c}$). Plussmärgiga avaldis on meile tuttav relatiivsusteooriast, negatiivne avaldis aga annab elektronile üsna kummalised omadused. Vaba elektroni positiivne energia võib muutuda $+\infty \dots m_0 c^2$, järgneks keelatud energiatega piirkond (keelutsoon) $+m_0 c^2 \dots -m_0 c^2$ laiusel $2 m_0 c^2$. Keelutsooni ületamisel peaks elektron kiirgama energia $2m_0 c^2$ ja sattuma negatiivsete energiatega piirkonda (negatiivne kineetiline ja seisuenergia!), kusjuures seal tema energia võib muutuda $-m_0 c^2 \dots -\infty$, s.t. elektron võib kiirates ära anda lõpmata palju energiat. Ühtlasi oleks negatiivsete energiatega piirkonnas elektroni mass negatiivne, s.t. jõu mõjul omandaks elektron jõuga vastasuunalise kiirenduse. Enamik füüsikuid soovitas negatiivse energia avaldise kui füüsikaliselt absurdse lihtsalt kõrvalle jätta. Kuid Dirac läks teist teed. Ta oletas, et üleminekud positiivse energiaga tasemetelt negatiivse energiaga tasemetele ei toimu seetõttu, et tavaliselt on kõik negatiivsed tasemed elektronidega täidetud (Pauli printsiibi tõttu ei saa elektron sinna üle minna). Kui üks negatiivsel energiatasemel asuv elektron saab juurde energia $\geq 2m_0 c^2$, võib ta üle minna positiivse energiaga tasemetele. Seejuures tekib üks elektron, negatiivse energiaga tasemele aga jääb auk, mis käitub nagu positiivse laenguga osake, mille mass

võrdub elektroni massiga. See ongi elektroni antiosake positron. Viimati kirjeldatud protsess on tuntud: kui footoni (γ -kvandi) energia $h\nu \geq 2m_0c^2$, siis tema vastasmõjul tuumaga võib tekkida elektron-positronpaar.

$$\gamma \rightarrow e_{-1}^0 + e_{+1}^0. \quad (717)$$

Tuntud on ka vastupidine protsess. Elektron ja positron kohtudes "kaovad", annihileeruvad ja tekib kaks footonit (kahe footoni teket nõuab energia ja impulsi jäävus):

$$e_{-1}^0 + e_{+1}^0 \rightarrow 2\gamma. \quad (718)$$

Analoogne arutlus kehtib kõigi fermionide kohta. Tegelikult on antiosakesed olemas ka bosonitel. Annihilatsioon on osakeste ja antiosakeste üldine omadus. Osakesel ja antiosakesel on ühesugune mass, ühesugune eluiga vaakumis, ühesugused spinnid (kuid magnetmomendi ja spinni orientatsioonid on vastupidised), suuruselt võrdsed, kuid vastasmärgilised laengud, samuti on vastasmärgilised kõik teised karakteristikud e. kvantarvud (näit. elektroni ja positroni leptonlaengud). Osakesi, millel kõik kvantarvud on võrdsed nulliga, nimetatakse tõeliselt neutraalseteks (näit. footon). Neil osakestel antiosakesed puuduvad (e. nende antiosakesed on identsed nende endiga).

Antiosakeste olemasolu tõstatas probleemi antiainest. Meie maailmas on püsivad elektron ja prooton, positron ja antiprooton aga ebapüsivad, sest kohtudes vastavalt elektroni ja prootoniga nad annihileeruvad. Järelikult vaakumis või keskkonnas, kus puuduksid elektronid, võiksid näiteks positronid eksisteerida lõpmata kaua. Positron ja antiprooton võivad moodustada antivesiniku aatomi, mis isoleeritud olekus või teiste antiaatomite keskkonnas oleks püsiv.

Tehislikult saadi esimene antituum - antideutron - 1965. a.

Võib oletada, et üksikud tähed või isegi galaktikad koosnevad antiainest. Niisuguste süsteemide kohtumine meie ainega lõppeks gigantse plahvatusega. Seni selliseid plahvatusi registreeritud ei ole.

Elementaarosakeste klassid

Sõltuvalt sellest, millises vastasmõjus elementaarosakesed osalevad, ning nende spinnist jagunevad kõik elementaarosakesed nelja klassi. Jaotada võib ka teiste karakteristikute põhjal, kuid piisab neist kahest. Jaotusest on välja jäetud resonantsid.

1. Footon. Klassi moodustabki üksainus osake. Footon on boson, ta on ise elektromagnetilise vastasmõju kandja. Footon ei osale tugevas ega nõrgas vastasmõjus.

2. Leptonid. Leptonid ei osale tugevas vastasmõjus. Nad on fermionid. Leptoneid on 12: elektron, müüon, tauon (taulepton); igaühele viimatinimetatutest vastab oma neutriino; kõigil nimetatud osakestel on antiosakesed (muundumisel (700) tekib elektron-antineutriino). Kõigile leptonitele omistatakse leptonlaeng +1, antileptonitele leptonlaeng -1. Leptonlaegul pole midagi ühist elektrilaenguga. Niisuguse karakteristikku sissetoomine on tingitud sellest, et kõigil protsessidel kehtib leptonlaengu jäävuse seadus. Leptonlaengut omavad ainult leptonid. Ainsana antileptonitest on eraldi nimetus elektroni antiosakesel positronil. Laenguga antileptoni tähis langeb kokku vastava leptoni tähisega, ainult laeng (indeksina ülal vasakul) on vastupidine. Laenguta antileptoni tähiseks (neutriinod) on vastava leptoni tähis lainelise joonega selle kohal.

3. Mesonid. Mesonid osalevad kõigis vastasmõjudes. Kuna nad osalevad ka tugevas vastasmõjus, siis on nad hadronid. Mesonid on bosonid, nende spinn on null, antimesoneid tähistatakse analoogselt antileptonitega. π^0 - ja η^0 -meson on tõeliselt neutraalsed osakesed.

4. Barüonid. Barüonid osalevad samuti kõigis vastasmõjudes. Nad on (nagu mesonidki) hadronid, erinevalt mesonitest on nad fermionid. Sellesse klassi kuuluvad nuklonid prooton ja neutron ning nendest raskemad osakesed, mille ühiseks nimetuseks on hüperonid. Kõigile barüonidele omistatakse barüonlaeng +1, antibarüonidele barüonlaeng -1. Kõigis protsessides kehtib barüonlaengu jäävuse seadus. Barüonlaengut omavad ainult barüonid.

Kõigi laetud elementaarosakeste laengu suurus on e (elementaarlaeng).

Klass	Osakese nimetus	Osa-ke	Anti-osake	Spinn, \hbar	Seisumass, m_e	Eluiga, s	
Footonid	Footon	γ		1	0	stab.	
Leptonid	Elektron	e^-	e^+	1/2	1	stab.	
	Elektron-neutrino	ν_e	$\bar{\nu}_e$		0	stab.	
	Müüon	μ^-	μ^+		207	10^{-6}	
	Muon-neutrino	ν_μ	$\bar{\nu}_\mu$		0	stab.	
	Tauon	τ	τ^+		3487	10^{-12}	
	Tauon-neutrino	ν_τ	$\bar{\nu}_\tau$	0	?		
Hadronid	Mesonid	π^0		0	264	10^{-16}	
		Pionid	π^+ π^-		273	10^{-8}	
		Kaaonid	K^+ K^-		966	10^{-8}	
			K^0 \bar{K}^0		974	10^{-10} - 10^{-8}	
		Eetame-son	η^0			1074	10^{-19}
		D-mesonid	D^+ D^-	3656	10^{-13}		
		D-mesonid	D^0 \bar{D}^0	3646	10^{-13}		
		F-mesonid	F^+ F^-	3955	10^{-13}		
	Barüonid	Prooton	p	\bar{p}	1/2	1836	stab.
		Neutron	n	\bar{n}		1839	10^3
Hüperonid: lambda		Λ^0	$\bar{\Lambda}^0$	1/2	2183	10^{-10}	
sigma		Σ^0	$\bar{\Sigma}^0$		2334	10^{-20}	
		Σ^+	$\bar{\Sigma}^+$		2328	10^{-10}	
		Σ^-	$\bar{\Sigma}^-$		2343	10^{-10}	
		Ξ^0	$\bar{\Xi}^0$	2573	10^{-10}		
ksii		Ξ^-	$\bar{\Xi}^-$	3/2	2586	10^{-10}	
oomega	Ω^-	$\bar{\Omega}^-$	3273		10^{-10}		

Kvargid

Praeguseks pole sisemist struktuuri avastatud ainult footonitel ja leptonitel. Hadronite sisemise struktuuri olemasolu on kindlaks tehtud. Kõik hadronid koosnevad fundamentaalosakestest, mida nimetatakse kvarkideks. Kvarkide idee kuulub Zweigile ja Gell-Mannile (1964).

Kõik hadronid on üles ehitatud kuuest kvargist (kuuenda kvargi olemasolu pole seni tõestatud, see järeldub teooriast). Seejuures koosneb iga meson kvargi-antikvargi paarist, barüon aga kolmest kvargist. Kvargid on järgmised.

Kvark	Spinn, \hbar	Laeng, e	Barüon laeng
u	1/2	2/3	1/3
d	1/2	-1/3	1/3
s	1/2	-1/3	1/3
c	1/2	2/3	1/3
b	1/2	-1/3	1/3
t	1/2	-1/3	1/3

Antikvargid erinevad kvarkidest elektrilaengu, barüonlaengu, samuti teiste karakteristikute (mida antud kursuses pole sisse toodud) märgilt.

Mõningaid näiteid hadronite kvark-koostise kohta.

Osake	Koostis	Spinnide orientatsioon
π^+	$u\bar{d}$	$\uparrow\downarrow$
π^-	$\bar{u}d$	$\uparrow\downarrow$
p	uud	$\uparrow\downarrow\uparrow$
n	udd	$\uparrow\downarrow\uparrow$
Ω^-	sss	$\uparrow\uparrow\uparrow$

Kuna kvargid on fermionid, siis näib r⁺isuguste kvarkide struktuur, mis koosnevad ühesugustest fermionidest paralleelsete spinnidega, olevat vastuolus Pauli printsibiga. Et seda vastuolu kõrvaldada, tuli kvarkidele omistada veel üks karakteristik, mida hakati nimetama värvuseks. Iga kvark võib olla kolme värvi: punane, kollane, sinine. An-

tikvarkidel on vastavalt täiendusvärvid. Need kolm värv kokku annavad valge, samuti annab iga värv koos oma täiendusvärviga valge. Kõigi hadronite koostis on selline, et nad on valged (värvitud).

Meie maailma koostisosadeks on elektron ja kvargid u ning d, nendest koosnevad tuumad ja aatomid.

Kvarkide omavaheline mõju on tugev, selle vahendajaks on gluonid. Gluonite seisumass on null, nad on bosonid ($s = 1$). Kvarkide omavahelist mõju uurib kvantkromodünaamika. Kooskõlas selle teooriaga kasvavad kvarkidevahelised jõud kauguse kasvades. Kui see on õige, siis on arusaadav, miks pole õnnestunud leida vabu kvarke, neid lihtsalt pole. Kauguse vähenedes jõud kvarkide vahel vähenevad. Seetõttu käituvad kvargid hadronites nagu peaaegu vabad osakesed, mis on küllalt heas kooskõlas katsetega.

Lõpetuseks

Koos kvarkmudeli loomisega tekkis idee ühendada kõik fundamentaalsed vastasmõjud ühtsesse teooriasse. Esimene samm sellel teel on tehtud. 1967. a. löid Weinberg ja Salam elektromagnetilise ja nõrga vastasmõju ühtse teooria - elektronõrga vastasmõju teooria. Järgmine ülesanne on ühendada elektronõrk ja tugev vastasmõju. Selle ülesandega tegeleb praegu intensiivselt nn. lokaalne kalibratsiooniteooria.

Lõplikku lahendamist ootab kvarkide probleem. Tuleb selgitada - nii teoreetiliselt kui eksperimentaalselt - kas kvargid ja leptonid on tõepoolest struktuurita fundamentaalosakesed, samuti lahendada kvarkide "igavese vangistuse" probleem.

Suure tähtsusega on neutriino massi lõplik kindlakstegemine - kas neutriinol on seisumass või mitte. Selles küsimuses seonduvad tihedalt elementaarosakeste füüsika ja astrofüüsika ning kosmoloogia. On võimalik, et üle 95 % universumi massist moodustavad neutriinod. Kui see nii on, siis muutuvad oluliselt ka meie arusaamad universumist ja tema evolutsioonist.

SISUKORD

II o s a

KVANTMEHAANIKA JA AATOMIFÜÜSIKA.....	3
Kvantmehaanika aparatuur.....	3
Aatomite ja molekulide füüsika.....	18
KVANTSTATISTIKA JA TAHKE KEHA FÜÜSIKA.....	54
Kvantstatistika.....	54
Bose-Einsteini statistika, Tahke keha soojus- mahtuvus.....	59
Fermi-Diraci statistika, Metallid ja pooljuhid	69
TUUMA- JA ELEMENTAAROSAKESTE FÜÜSIKA.....	97
Aatomituumad.....	97
Looduslik radioaktiivsus.....	106
Tuumareaktsioonid.....	112
Elementaarosakesed.....	122