

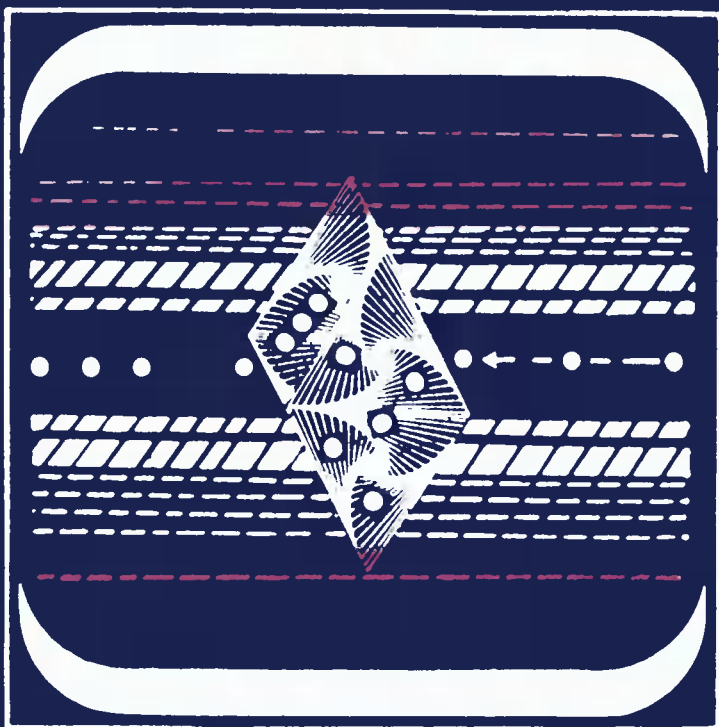
ФИЗИКА

ПОДПИСНАЯ НАУЧНО-ПОПУЛЯРНАЯ СЕРИЯ



1983/3

М.А.Кожушнер ТУННЕЛЬНЫЕ ЯВЛЕНИЯ



ЗНАНИЕ

НОВОЕ В ЖИЗНИ, НАУКЕ, ТЕХНИКЕ

НОВОЕ В ЖИЗНИ, НАУКЕ, ТЕХНИКЕ

ПОДПИСНАЯ НАУЧНО-ПОПУЛЯРНАЯ СЕРИЯ

ФИЗИКА

3/1983

Издается ежемесячно с 1964 г.

М. А. Кожушнер

**ТУННЕЛЬНЫЕ
ЯВЛЕНИЯ**

Издательство «Знание» Москва 1983

Автор: Мортко Аврумович КОЖУШНЕР — доктор физико-математических наук, специалист в области физики твердого тела и химической физики, активно занимающийся теорией туннельных явлений, автор нескольких популярных работ по физике твердого тела.

Рецензент: Каганов М. И., доктор физико-математических наук, профессор.

Кожушнер М. А.

К 58 Туннельные явления. — М.: Знание, 1983. — 64 с. — (Новое в жизни, науке, технике. Сер. «Физика»; № 3).

11 к.

В брошюре рассказывается о туннельном эффекте и его многообразных проявлениях в ядерной физике, физике твердого тела, в химических реакциях, начиная с альфа-распада и кончая новейшими исследованиями туннелирования частиц в полупроводниках и в низкотемпературных химических реакциях.

1704070000

ББК 22.38
530.4

ВВЕДЕНИЕ

Туннельный эффект известен физикам уже более 50 лет, со времени создания квантовой механики. Казалось бы, с тех пор он должен быть до «косточек» разобран, и появление брошюры о туннельных явлениях в серии «Новое в жизни, науке, технике» может вызвать недоумение.

В развитии физики, как, впрочем, и других наук, можно выделить два основных направления. Первое из них мы назвали бы интенсивным. Оно состоит в углублении нашего понимания сущности вещей, в изучении новых закономерностей и связей, составляющих фундамент физической картины мира. В первую очередь в наше время к этому направлению относится физика элементарных частиц, в которой изучаются и формулируются новые, до сих пор неизвестные законы субъядерного взаимодействия.

Второе направление развития физики — экстенсивное, развитие вширь. Оно сводится к изучению все более широкого класса все более сложных объектов на основании твердо установленных физических законов, управляющих ими. Например, теория атомов и молекул, физика твердого тела базируются главным образом на нерелятивистской квантовой механике, на основном уравнении квантовой механики — уравнении Шредингера. Однако сложность изучаемых систем, разнообразие условий, в которых они могут находиться, приводит к многочисленным и иногда совершенно неожиданным физическим эффектам. Возникает широчайшее поле деятельности для физиков — теоретиков и экспериментаторов, огромное количество технических приложений результатов физических исследований. Поразительные успехи физики твердого тела, лазерной физики и др. лег-

ли в основу современной научно-технической революции

Физика туннельных явлений принадлежит в основном ко второму направлению. Общие физические закономерности объединяют самые разнообразные туннельные эффекты: α -распад, холодную эмиссию электронов, примесную проводимость полупроводников, низкотемпературные химические реакции и много других. В последние два десятилетия было открыто много новых туннельных эффектов, имеющих интересные и многообещающие технические приложения. Несмотря на свой солидный возраст, туннельный эффект далеко еще не раскрыл все многообразие своих проявлений в различных областях физики, химии, биологии, техники. Свидетельство тому — все большее число работ, посвященных различным аспектам туннелирования, появляющихся в наших и зарубежных научных журналах. Следует отметить, что советские ученые внесли весьма существенный вклад в развитие физики туннельных явлений как в теоретическом, так и в экспериментальном плане.

О физической сущности туннельных явлений, о различных их проявлениях, о современных успехах в этой области и будет рассказано в настоящей брошюре.

РАБОТА И ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ

Понятия «туннелирование», «туннельный переход» появились в физике более полувека назад, в 1928 г. Объяснение явлений, которые обозначались этими терминами, было одним из блестящих триумфов только что появившейся квантовой механики. С тех пор они заняли прочное место не только в физике микромира, но и в физике твердого тела, и в химии, и в их многочисленных технических приложениях. Для того чтобы до конца понять, что такое туннелирование, вспомним некоторые положения классической механики.

Более трехсот лет назад Исаак Ньютон сформулировал основные уравнения (или законы) механики. Произвольное движение материального тела подчиняется второму закону Ньютона:

$$F = ma. \quad (1)$$

Здесь F — полная сила, действующая на тело массы m , a — ускорение, которое тело приобретает под дейст-

вием этой силы. Если сила F сложно зависит от координат тела, то закон движения не всегда можно найти в аналитическом виде, потому что надо решать, вообще говоря, сложное нелинейное дифференциальное уравнение.

Но очень часто многие весьма важные характеристики движения удается установить, и не решая этого уравнения. Этому помогают так называемые интегралы движения, величины, сохраняющиеся во время движения. Важнейшей такой величиной является энергия. Для дальнейшего рассмотрения нам важно выяснить, какова энергия частицы, движущейся под действием некоторой силы.

Очень часто работа силы не зависит от того, как проходит траектория частицы, а зависит исключительно от положения начальной r_1 и конечной r_2 точек траектории. Такие силы называются потенциальными, а выражение для работы силы можно записать в виде

$$A_{1-2} = U(r_1) - U(r_2). \quad (2)$$

Мы ввели здесь некоторую функцию координат — $U(r)$, потенциальную энергию. Примером потенциальных сил является сила тяжести $F = mg$, $U = mgh$, где h — высота над поверхностью Земли. Кулоновские силы взаимодействия между зарядами q_1 и q_2 , находящимися на расстоянии r друг от друга, $F = q_1 q_2 / r^2$, также потенциальны, и кулоновская энергия $U = q_1 q_2 / r$.

Для потенциальных сил закон сохранения механической энергии может быть сформулирован очень просто: сумма кинетической энергии тела $mv^2/2$ и потенциальной энергии, полная энергия, не изменяются во время движения: $E = E_{\text{кин}} + U = \text{const}$.

Рассмотрим теперь подробнее движение тела под действием потенциальных сил. Если известна полная энергия системы E , то скорость тела связана с его положением в пространстве. Действительно, $mv^2/2 + U(r) = E$, отсюда

$$v = \pm \sqrt{\frac{2[E - U(r)]}{m}}. \quad (3)$$

Знаки $+$ и $-$ перед корнем соответствуют тому, что тело может двигаться как в прямом, так и в противоположном направлении. Так как скорость не может

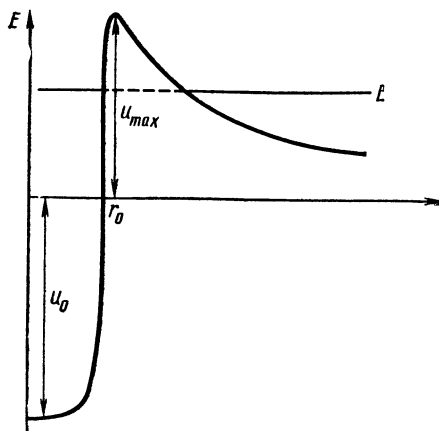


Рис. 1

быть мнимой, подкоренное выражение должно быть положительным, т. е. $E \geq U(r)$. Это неравенство накладывает ограничения на область пространства, в которую может проникнуть тело, имея заданную энергию. Например, при движении в поле сил тяжести вблизи поверхности Земли предельная высота подъема тела h (когда скорость тела становится равной нулю, $v=0$) связана с энергией E , которая приходится на движение в вертикальном направлении, соотношением $h=E/mg$.

На графике зависимости потенциальной энергии частицы от координаты область, где полная энергия $E \geq U(r)$ и есть допустимая область движения частицы.

График потенциальной энергии взаимодействия заряженных ядерных частиц, например двух ядер, приведен на рис. 1. В области $r > r_0$ действуют силы отталкивания, и $U(r)$ уменьшается с ростом r , так как согласно определению потенциальной энергии она уменьшается в направлении действия силы. При $r=r_0$ силы притяжения становятся много больше сил отталкивания и потенциальная энергия резко меняет характер зависимости от r , образуя так называемую потенциальную яму притяжения. Глубина этой ямы U_0 — характерный параметр ядерного взаимодействия, равна $\sim 20 \text{ МэВ} = 2 \cdot 10^7 \text{ эВ}$. Напомним, что 1 эВ — это энергия, которую набирает частица с зарядом электрона, проходящая разность потенциалов в 1 В , $1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$.

Если потенциальная энергия как функция координаты

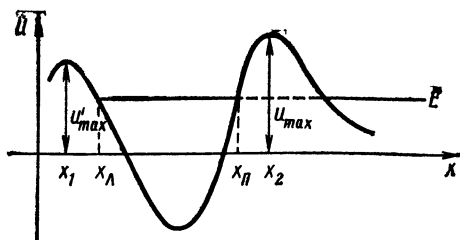


Рис. 2

ты имеет минимум, то область пространства между двумя максимумами, лежащими по обе стороны минимума, называют потенциальной ямой (на рис 2 это область между x_1 и x_2) Если частица находится в потенциальной яме и ее энергия E меньше максимальных значений потенциальной энергии по обе стороны ямы, то она не сможет выйти из ямы и будет совершать в ней колебательное движение, попеременно отражаясь от стенок ямы (на рис 2 область движения ограничена координатами $x_{л}$ и $x_{п}$) В этом случае говорят, что частица захвачена потенциальной ямой. Частица не выйдет из ямы, пока ее энергия под каким-либо внешним воздействием не станет больше U'_{max} или U_{max} — высот потенциальных барьеров, ограждающих яму.

В квантовой механике, которой подчиняется движение микрочастиц, положение существенно изменяется.

НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ЧАСТИЦЫ

В классической механике движение частицы вполне описывается заданием ее координат и скорости в каждой точке траектории. Чтобы описать движение любой сложной системы, достаточно задать координаты и скорости всех частиц, входящих в систему, в определенный момент времени, после этого с помощью уравнений движения (второй закон Ньютона) можно найти координаты и скорости в любой другой момент времени. Хотя фактически такой расчет для сложной системы произвести иногда очень трудно, однако принципиально он всегда возможен Координаты и скорости частиц, задаваемые одновременно, — это тот язык, на котором

классическая механика задает вопросы Природе и получает вполне однозначные ответы, если имеются в виду движения макроскопических тел.

Когда мы переходим в область микромира, оказывается, что такой язык уже не соответствует Природе, неадекватен ей. Окончательно это стало ясно в 20-х годах нашего века. Для описания явлений микромира была разработана квантовая механика. Создание квантовой механики, полувековой юбилей которой отмечался недавно учеными всего мира, проникновение квантовомеханических представлений в сознание ученых были одной из величайших революций в естествознании, в корне изменившей многие наши представления о Природе.

В квантовой механике движение частицы описывается волновой функцией — функцией координат и времени $\psi(r, t)$. Если задана потенциальная энергия как функция координат и задано начальное состояние (т. е. задана волновая функция в начальный момент времени), то волновая функция частицы в произвольный момент времени однозначно определяется из уравнения Шредингера, основного уравнения квантовой механики, аналогично тому, как уравнение Ньютона (1) дает подобный ответ о состоянии частицы в классической механике.

Зная волновую функцию микрочастицы, можно получить сведения о ее поведении, которые дают нам макроскопические приборы. Волновая функция, вообще говоря, комплексна. Квадрат ее модуля — $|\psi(r, t)|^2$ — определяет вероятность пребывания частицы в точке r в момент времени t . Характерно, что, как правило, из волновой функции можно определять лишь вероятностное распределение таких характеристик частицы, как скорость, ускорение, положение в данный момент времени. Однако закон сохранения полной энергии остался неизменным и в квантовой механике, т. е. можно говорить о точной сохраняющейся полной энергии системы.

Поведение волновой функции довольно часто напоминает поведение классической волны (например, волны на поверхности воды, звуковой, электромагнитной волны), поэтому она и названа волновой. В зависимости от того, что и как измеряется в состоянии частицы, на первый план выступают то такие качества, которые мы привыкли приписывать «настоящей» частице, так на-

зываемые корпускулярные свойства, то волновые свойства. Но надо все время помнить, что это просто различные проявления волновой функции, однозначно описывающей ее состояние. Наиболее точно это положение сформулировал Макс Борн, автор вероятностного истолкования волновой функции: «...движение частиц следует вероятностным законам, но сама вероятность распространяется по законам причинности. Это значит, что знание состояния во всех точках в некоторый момент времени определяет распределение состояний для всех последующих времен».

Важнейшим физическим положением квантовой механики, которое может быть выведено из уравнения Шредингера, является знаменитый принцип неопределенности Гейзенберга. Не вдаваясь в его полную формулировку, его можно выразить следующим образом: некоторые макроскопические характеристики системы принципиально не могут быть измерены одновременно, например, импульс частицы $p = mv$ и ее координата x . А именно, если неточность при определении импульса — Δp , а неточность координаты — Δx , то

$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (4)$$

где \hbar — квантовая постоянная Планка. Причем такое соотношение не связано с несовершенством измерительных приборов, оно внутренне присуще квантовой механике. Соотношение неопределенности позволяет качественно предсказать многие явления в микрофизике без их точного математического описания.

Как мы уже упоминали выше, согласно классической механике частица не может проникнуть под потенциальный барьер, так как это означало бы, что ее кинетическая энергия стала отрицательной. Однако согласно соотношению неопределенности и кинетическая, и потенциальная энергия не могут быть одновременно определены точно. Кинетическая энергия $E_{\text{кин}} = p^2/2$ зависит только от импульса, а потенциальная $U(x)$ — только от координаты. Следовательно, их одновременное точное задание противоречило бы соотношению неопределенности. Поэтому если мы говорим, что частица находится где-то под барьером, например, между x_1 и x_2 на рис. 2, то это значит, что $\Delta x \leq |x_2 - x_1|$, тогда

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2|x_2 - x_1|}$$

т. е. кинетическая энергия определена точно, и нельзя утверждать, что она определено отрицательная. Это говорит о том, что вероятность обнаружить частицу внутри потенциального барьера может не равняться нулю. Точное решение уравнения Шредингера действительно показывает, что волновая функция частицы отлична от нуля внутри барьера. Подчеркнем еще раз, что значение полной энергии частицы тем не менее определено точно.

ТУННЕЛЬНОЕ ПРОХОЖДЕНИЕ

На примере прямоугольного потенциального барьера выясним некоторые качественные и количественные характеристики побарьерного прохождения частиц (рис. 3). Пусть частица с массой m и энергией E налетает слева на барьер высотой U_0 . Если энергия меньше высоты потенциального барьера, классическая частица отразится от него и полетит в обратном направлении — налево. Для квантовой частицы существует определенная вероятность оказаться около точки x_2 , т. е. просочиться сквозь барьер, толщина которого d , и продолжать движение направо. Эта вероятность приблизительно определяется следующим выражением:

$$\omega \simeq \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} d\right]. \quad (5)$$

Поясним, что понимается под термином «вероятность проникновения под барьером». В соответствии с вероятностным толкованием волновой функции это значит, что если к барьеру слева подходит N частиц с энергией E (или со скоростью $\sqrt{2E/m}$), то доля ω (т. е. ωN частиц) от полного числа частиц пройдет через барьер, а доля $(1-\omega)$, т. е. $(1-\omega)N$ частиц отразится от него и начнет двигаться налево. Естественно, что полное число частиц $N = \omega N + (1-\omega)N$ сохраняется. Такой процесс можно наглядно представить себе так, как будто бы частица вырывает себе под потенциальным барьером «туннель». Отсюда сам процесс называют туннельным проникновением или туннельным эффектом.

Как видно из выражения для вероятности туннели-

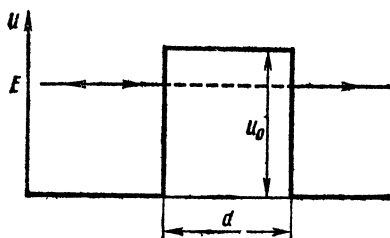


Рис 3

рования (5), она тем меньше, чем больше ширина барьера и чем меньше энергия налетающей частицы. Проницаемость барьера также уменьшается с увеличением массы частицы. Поскольку все эти параметры стоят в показателе экспоненты, то зависимость вероятности от них очень резкая. Очевидно, туннельный эффект возможен только для очень легких частиц на очень маленьких расстояниях. Чтобы убедиться в этом, оценим вероятность туннельного проникновения различных частиц через потенциальные барьеры.

Поместим на близком расстоянии друг от друга две металлические пластинки, например железо. Зависимость потенциальной энергии атома и электрона от координаты примерно такова, как на рис. 3.

Высоту потенциального барьера для атома можно считать примерно равной той энергии, которую нужно затратить, чтобы оторвать атом от кристалла, т. е. энергии сцепления атома в кристалле. Для железа эта энергия равна 3,7 эВ. Вероятность туннелирования атома железа сквозь барьер — расстояние между пластинками — толщиной $d = 10 \text{ \AA} = 10^{-7} \text{ см}$, который всего втрое больше межатомного расстояния в кристалле железа, оказывается равной $e^{-2300} \approx 10^{-1000}$ (при расчете по формуле (5) мы учли, что масса атома железа $m \approx 8,5 \cdot 10^{-23} \text{ г}$, $\hbar \approx 10^{-27} \text{ эрг с}$). Полученная вероятность туннелирования невообразимо мала. Все время существования Вселенной слишком мало, чтобы можно было дожидаться туннельного перехода хотя бы одного атома.

Посмотрим теперь, какова вероятность туннелирования электрона в той же ситуации. Высота потенциального барьера для электрона — это та энергия, которую нужно сообщить ему, чтобы он вылетел из металла, так называемая работа выхода. Для железа она равна

4,2 эВ, т. е. близка к высоте потенциального барьера для атома. Однако масса электрона почти в 100 000 раз меньше массы атома Fe. Поэтому для вероятности его туннелирования получается несравненно большая величина $w \simeq 10^{-10}$. Хотя на первый взгляд и это тоже очень маленькая вероятность, тем не менее за ее счет уже можно получить весьма большие потоки электронов. Действительно, если плотность электронов проводимости (т. е. электронов, свободно движущихся по металлу) равна $\sim 10^{23}$ электронов/см³, а скорость каждого электрона $v = 3 \cdot 10^7$ см/с, то за 1 с на 1 см² поверхности налетает 10^{30} частиц. Тогда число частиц, протуннелировавших за 1 с из одной пластинки в другую, равно $wN \simeq 10^{20}$ электронов/см².

Поскольку число электронов, туннелирующих слева направо и справа налево, одинаково, ток через барьер отсутствует. Если же создать на барьере напряжение порядка 1 В, то можно получить токи порядка долей ампера или даже амперов, т. е. вполне наблюдаемые и даже большие токи, которые в полном смысле слова можно считать туннельными. Заметим, что потенциальный барьер теперь будет не такой, как на рис. 3, так как потенциальная энергия на краях барьера неодинакова. Однако пока разница потенциальных энергий заметно меньше работы выхода электрона, вероятность туннельного перехода остается по порядку величины такой же, как и в отсутствие напряжения.

Если увеличить щель между пластинами вдвое, до 20 Å, то вероятность туннелирования упадет на 10 порядков, т. е. станет равной 10^{-20} . При этом ток тоже упадет на 10 порядков. Щель в 30—40 Å уже полностью прервет ток.

Когда ширина потенциального барьера становится очень большой (в нашем примере — расстояние между двумя пластинами железа), частица может вырваться из потенциальной ямы, только если ее энергия окажется больше высоты потенциального барьера, что в реальных условиях может произойти за счет тепловых флуктуаций. Если абсолютная температура T отлична от нуля, то некоторая доля частиц будет иметь энергию, достаточную для преодоления потенциального барьера. Эта доля $w(E)$ пропорциональна $\exp(-E/kT)$, где k — постоянная Больцмана. Такой термоактивационный путь преодоления барьера конкурирует с туннельным.

Чем ниже температура, тем меньшая доля частиц имеет энергию E , большую, чем U_0 , необходимую для перескока через потенциальный барьер, и тем большую роль будет играть туннелирование. Как мы уже замечали, если энергию частицы увеличить, то вероятность туннелирования увеличивается. Поэтому очень часто термоактивационный и туннельный механизмы действуют сообща. Переход происходит с наибольшей вероятностью следующим образом: сначала частица благодаря термической активации получает некоторую энергию E_a меньшую, чем высота барьера, а затем туннелирует с этой энергией. Более подробно мы будем об этом говорить при обсуждении различных физических приложений туннельного эффекта.

Возникновение туннельного эффекта связано с квантовыми свойствами частиц, с тем, что их движение имеет волновой характер. В некоторых классических волновых процессах, таких, как явление полного внутреннего отражения электромагнитных волн, также наблюдаются явления, аналогичные туннельному эффекту в квантовой механике.

Как известно, при переходе света из одной среды в другую происходит преломление света, связанное с изменением его скорости в разных средах. Оптическая характеристика среды — показатель преломления $n = c/v$, где c — скорость света в вакууме, v — скорость света в среде. На границе раздела двух сред луч света разделяется на два: отраженный и преломленный. Согласно законам геометрической оптики угол падения луча φ_1 и угол преломления φ_2 связаны законом Снеллиуса: $n_1 \sin \varphi_1 = n_2 \sin \varphi_2$. Если $n_1 > n_2$, то для угла падения, большего, чем $\arcsin \frac{n_2}{n_1}$ (этот угол называется углом полного внутреннего отражения), из закона Снеллиуса получается мнимое значение угла преломления ($\sin \varphi_2 > 1$). Это означает, что при таком угле падения преломленного луча нет, есть только отраженный. Интенсивность отраженного луча точно равна интенсивности падающего.

Геометрическая оптика не учитывает волновых свойств света. Решение уравнений Максвелла для электромагнитных колебаний вблизи поверхности раздела сред показывает, что интенсивность света во второй среде отлична от нуля, но очень быстро, по экспоненте, за-

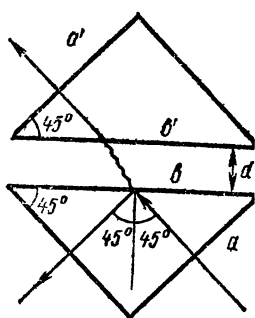


Рис. 4

тухает при удалении от поверхности. Эксперимент, схема которого изображена на рис. 4, демонстрирует явление проникновения света в область, «запрещенную» геометрической оптикой.

На грань a прямоугольной равнобедренной призмы перпендикулярно к ней падает луч света и, не преломляясь, проходит до грани b . Угол падения луча на грань b больше угла полного внутреннего отражения (для стекла $n_2 = 1,5$, угол полного внутреннего отражения 40°). Однако если на небольшом расстоянии d от грани b помещена такая же призма, то свет через грань b' пройдет в нее и выйдет через грань a' параллельно лучу, падавшему на грань a . Интенсивность прошедшего светового потока экспоненциально спадает с увеличением толщины промежутка d . $w \sim \exp(-\beta d/\lambda)$. Здесь β — коэффициент, зависящий от показателя преломления стекла, а λ — длина волны падающего света. Можно видеть, что проникновение света в «запрещенную» область представляет собой оптическую аналогию квантовомеханического туннельного эффекта.

До сих пор мы рассматривали туннелирование через прямоугольный потенциальный барьер. Такая форма барьера является скорее исключением, нежели правилом. Гораздо чаще встречаются случаи, когда высота потенциального барьера зависит от координаты. Поэтому получить единое выражение, описывающее вероятность туннелирования, нельзя, для каждого конкретного условия приходится решать уравнение Шредингера и находить волновую функцию. Однако характер зависимости вероятности туннелирования остается прежним:

она очень быстро убывает с увеличением расстояния туннелирования и массы частицы.

Если потенциальная энергия достаточно медленно изменяется с координатой, то может быть получена и общая формула для вероятности туннелирования:

$$w \simeq \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1(E)}^{x_2(E)} \sqrt{2m[U(x)-E]} dx\right\}. \quad (6)$$

Здесь пределы интегрирования $x_1(E)$ и $x_2(E)$ — это координаты тех точек, где $E = U(x)$. В этих точках при классическом движении кинетическая энергия частицы обращается в нуль, и она меняет направление своего движения на обратное. Видно, что энергия входит не только под знак интеграла, но и в определение пределов интегрирования — чем меньше энергия частицы, тем шире барьер для туннелирования. Поэтому вероятность туннелирования еще более резко зависит от энергии частицы, чем в случае постоянного барьера. Если в выражении (6) потенциальная энергия $U(x)$ постоянна и равна U_0 , мы получаем формулу (5).

До сих пор мы говорили о вероятности туннельного прохождения через барьер, трактуя ее как долю потока налетающих на барьер частиц, проникших на другую сторону барьера. Частицы подходили к барьеру из бесконечности и уходили на бесконечность либо справа, либо слева от барьера. Однако в физике как правило приходится иметь дело с частицами, движение которых происходит в ограниченной области пространства. Им не дают уйти на бесконечность потенциальные барьеры — частицы находятся в потенциальной яме (пример такой ямы для одномерного движения изображен на рис 5).

Если бы барьеры были проницаемы, то частица находилась в яме бесконечно долго, пока какое-нибудь внешнее воздействие не увеличило ее энергию до величины, большей высоты барьера. Тогда частица могла бы улететь из ямы. В яме частица, вообще говоря, совершает некоторое колебательное движение, двигаясь от одной стенки к другой и обратно. Напомним, что такое описание неточно, в действительности в стационарном состоянии волновая функция частицы описывает некоторое вероятностное распределение в области ямы, и нельзя говорить о том, что частица в данный момент

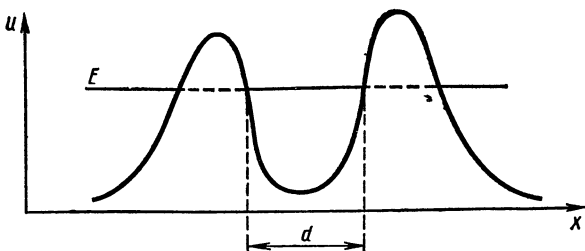


Рис 5

времени имеет скорость, направленную определенным образом. Однако такое полуклассическое описание пригодно для оценок вероятности туннелирования, тем более что чем выше энергия частицы в яме, тем точнее такое описание соответствует истинному поведению частицы.

Учтем теперь проницаемость барьера. Тогда при каждом ударе частицы о правую или левую стенку она с отличной от нуля вероятностью может протуннелировать сквозь барьер и оказаться вне ямы. Если период колебаний частицы в яме обозначим t_0 , то за время t частица t/t_0 раз ударится о каждый барьер. Вероятность туннелирования за одно столкновение равна ω , а за t/t_0 столкновений — соответственно $\omega t/t_0$. Тогда время τ , в течение которого вероятность туннелирования равна ~ 1 , называется временем жизни частицы в яме: $\tau = t_0/\omega$. Вероятность ω равна сумме вероятностей туннелирования через правый и левый барьеры, которые можно определить по формуле (6). Если в начальный момент времени частица наверняка находилась в яме, то через время порядка τ она почти наверняка окажется вне ямы.

Таким образом система (частица в потенциальной яме типа изображенной на рис. 5), абсолютно устойчивая согласно представлениям классической механики, т. е. могущая существовать вечно, если нет достаточно сильных внешних воздействий, оказывается неустойчивой, способной к распаду, и время жизни такой системы (при заданной форме потенциальной ямы и массе частицы) оказывается сильно зависящим от энергии частицы.

С такими системами наука впервые столкнулась, когда была открыта радиоактивность. Таинственные зако-

номерности радиоактивного распада стали понятны только после создания квантовой механики, т. е. спустя 30 лет после открытия Беккереля

α -РАСПАД

Беккерель сделал свое открытие через год после сенсационного открытия Рентгеном излучения, названного его именем. И ученые, и широкая публика были крайне взбудоражены новыми проникающими лучами, и поэтому открытие Беккереля сначала прошло почти незамеченным. Да и сам Беккерель сначала рассматривал открытое им излучение как один из вариантов рентгеновского. Он писал об этом так: «я показал, что соли урана испускают лучи, о существовании которых не было до этого известно, и что эти лучи обладают замечательными свойствами, часть которых сходна со свойствами, изученными Рентгеном». Однако вскоре это открытие привлекло пристальное внимание физиков всего мира, особенно после замечательных работ супругов Пьера Кюри и Марии Склодовской Кюри. Они показали, что особо интенсивное излучение исходит не от урана, а от неизвестных до того и открытых ими элементов, которые получили названия «радий» и «полоний». Само явление по предложению Кюри было названо радиоактивностью.

Вскоре стало известно, что радиоактивное излучение состоит из трех компонент — α , β и γ излучения. Последнее — самое проникающее, оно может проходить через толстые слои вещества. Его проникающая способность оказалась больше, чем у рентгеновских лучей. Так же как радиоволны, видимый свет, рентгеновские лучи, γ излучение — это электромагнитное излучение, но только очень коротковолновое. Длина волны γ излучения, появляющегося в радиоактивном распаде, короче длин волн, соответствующих области видимого света, в несколько миллионов раз. Было установлено, что β излучение — это быстрые электроны, а α излучение — тяжелые положительно заряженные частицы, которые впоследствии были отождествлены с ядрами атомов гелия. Масса α частицы примерно в 4 раза больше, чем масса ядра водорода, протона, а ее заряд вдвое больше заряда протона.

Явление радиоактивности поразило воображение

ученых: атомы одних элементов самопроизвольно распадаются, превращаясь в атомы других элементов! После открытия атомного ядра стало ясно, что радиоактивный распад — это результат каких-то процессов, происходящих в ядрах атомов. Выяснилось, что каждый радиоактивный элемент распадается со своей, только ему присущей скоростью, которую принято характеризовать периодом полураспада τ_{π} . За время, равное τ_{π} , распадается половина из имеющихся ядер. Закон изменения числа ядер со временем оказался строго экспоненциальным

$$N(t) = N_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_{\pi}} \ln 2\right),$$

где N_0 — это количество ядер, которое было в начальный момент времени

Период полураспада совершенно не зависит от того, в каком состоянии находится вещество, ядра которого распадаются в твердом, жидком или газообразном. Делались многочисленные попытки как-то повлиять на распад радиоактивных веществ: подвергали высоким давлениям, нагревали до высоких температур и охлаждали до температур всего в несколько градусов выше абсолютного нуля, переводили радиоактивные элементы во всевозможные химические соединения — и никакого эффекта! С расширением числа радиоактивных элементов физики столкнулись с большим разнообразием периодов полураспада — от миллионных долей секунды до миллиардов лет. Неизменными оставались лишь закон распада и невозможность как-либо изменить его скорость.

Впоследствии стало ясно, что радиоактивный распад — это самопроизвольное изменение атомных ядер. Некоторые ядра оказываются неустойчивыми: либо из них вылетает α -частица, либо один из нейтронов превращается в протон (при этом из ядра вылетают электрон и антинейтрино), либо протон переходит в нейтрон — и из ядра вылетают позитрон и нейтрино. Почти всегда радиоактивный распад сопровождается излучением жестких (коротковолновых) квантов электромагнитного поля — γ -квантов. Размеры ядер около 10^{-12} см, частицы в них удерживаются вместе мощными силами ядерного притяжения, радиус действия которых около 10^{-13} см, а глубина потенциальной ямы для одной частицы — около 20 МэВ. Поэтому все радиоактивные

процессы связаны с энергиями в десятки и сотни тысяч электронвольт

Все ядра радиоактивного элемента одинаковы, тем не менее одно ядро распадается раньше, другое позже. Нельзя предсказать точно момент распада какого ни будь ядра, можно говорить лишь о вероятности его распада за какое то время. Так как радиоактивный распад связан с процессами, происходящими внутри одного ядра, а не со свойствами коллектива атомов вещества, вероятностный характер радиоактивного распада определяется вероятностным характером процессов в одном ядре.

В классической физике статистический, вероятностный характер явления всегда ассоциируется с описанием большого коллектива частиц и неопределенностью характера движения отдельной частицы, входящей в коллектив. Этот подход является основой статистической физики, разработанной в XIX — начале XX века. В радиоактивном же распаде физики впервые столкнулись со статистическими, вероятностными закономерностями процесса, состоящего в вылете из небольшой системы всего одной частицы — электрона или α частицы.

Закономерности радиоактивного распада стали понятны только после создания квантовой механики, когда независимо Гамов в СССР и Кондон и Герни в США в 1928 г создали теорию радиоактивного α распада.

Если считать, что α частица существует как единое образование внутри ядра, то график ее потенциальной энергии в зависимости от расстояния до центра ядра выглядит как кривая на рис 1. В действительности, такое представление, конечно, слишком упрощено, но расчеты α распада, проведенные с учетом реальной структуры ядра, приводят к результатам, близким к полученным Гамовым для простой модели.

Примерная зависимость потенциальной энергии α частицы от координаты вдоль любой прямой, проходящей через центр ядра, имеет кратероподобный вид (рис 6). Глубина «кратера вулкана» соответствует энергии взаимодействия с помощью ядерных сил и составляет несколько десятков мегаэлектронвольт, «склоны вулкана» — энергия кулоновского отталкивания α частицы от остальной части ядра. Высота потенциального барьера — это энергия кулоновского отталкивания на границе ядра.

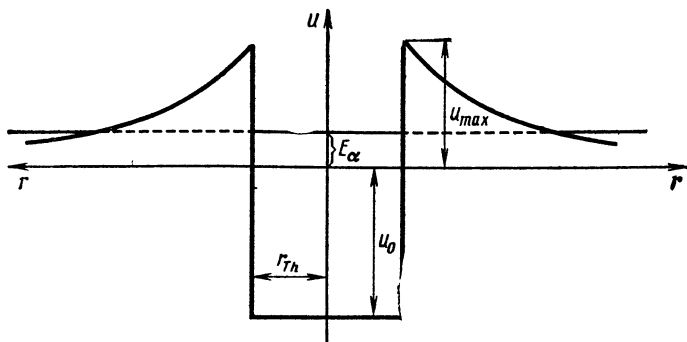
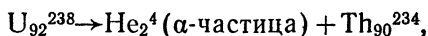


Рис 6

Например, чтобы произошел α распад ядер урана



α частица должна преодолеть потенциальный барьер, связанный с кулоновским отталкиванием ее от ядра тория. Радиус ядра тория r примерно равен $8 \cdot 10^{-13}$ см. Тогда высота барьера

$$U_{\max} \simeq \frac{2Ze^2}{r_0} \simeq 25 \text{ МэВ}$$

Если следовать классической физике, то α -частица должна была бы вдали от материнского ядра иметь энергию 25 МэВ, чтобы преодолеть потенциальный барьер. На опыте, однако, энергия α -частицы составляет 4,2 МэВ.

Гамов впервые показал, что закономерности α -распада могут быть объяснены с помощью туннельного эффекта. В своей статье он писал: «Если рассмотреть эту проблему с точки зрения волновой механики, то трудности отпадут сами по себе. В волновой механике частицы всегда обладают конечной, отличной от нуля вероятностью перейти из одной области в другую с такой же энергией даже в том случае, когда эти области разделены барьером произвольной, но не бесконечно большой высоты».

В соответствии с моделью Гамова вероятность проникновения α -частицы через барьер за одно столкновение определяется соотношением (6). Если считать, что $U(x) = Ze^2/x$, m и E — масса и энергия α -частицы, то

$$w \simeq \exp \left\{ -\frac{2\pi Ze^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E}} \right\}, \quad (8)$$

и для ядра урана U_{92}^{238} w равно $\sim 10^{-38}$.

Как мы уже говорили, вероятность туннелирования за 1 с равна $w\nu$, где ν — частота колебаний α -частицы в ядре, которая для урана равна 10^{21} с $^{-1}$. Вероятность α -распада получается равной 10^{-17} с $^{-1}$, соответственно период полураспада 10^{17} или около 3 млрд лет. Истинный период полураспада ядер урана составляет 4,5 млрд лет. Таким образом уже простая модель, основанная на туннельном характере α -распада, приводит к согласию с опытом точно до множителя порядка единицы. Это свидетельствует о правильности физических представлений, положенных в основу модели.

Несмотря на малость вероятности α -распада урана, он тем не менее вполне наблюдаем, так как в процессе распада принимают участие очень много ядер. Так, в 4 г урана содержится $\sim 10^{22}$ ядер, т. е. за секунду распадается $10^{22} \cdot 10^{-17} = 10^5$ ядер. Каждая α -частица уносит с собой 4,2 МэВ — $6,7 \cdot 10^{-6}$ эрг. За час будет выделено только при распаде урана более 2000 эрг, энергия хотя и небольшая, но уже вполне заметная.

Успех теории α -распада показал, что квантовая механика применима не только на атомных, но и на ядерных масштабах. Формулы Гамова для вероятности α -распада предсказывали не только величину периода полураспада, но, что гораздо важнее, и вид зависимости периода полураспада от энергии. Была замечена удивительная корреляция между энергией α -частицы и периодом соответствующего полураспада: с увеличением энергии α -частицы период полураспада резко уменьшался. При распаде одного и того же ядра могут получаться α -частицы с разными энергиями, и дочерние ядра оказываются в состояниях с разными энергиями. Энергия вылетающих α -частиц не может изменяться непрерывно, так как уровни энергии как материнского, так и дочернего ядер дискретны, поэтому и разность между ними дискретна.

Если дочернее ядро (при распаде $U_{92}^{238} \rightarrow He_2^4 + Th_{90}^{234}$ это ядро Th_{90}^{234}) оказалось в возбужденном состоянии, оно перейдет в основное состояние, испустив γ квант. Поэтому α -распад сопровождается γ излучением. Чем меньше энергии уносит α -частица, тем меньше вероят-

ность распада, т е тем больше период полураспада. Именно это, как мы уже говорили, наблюдается на эксперименте.

В цепочке радиоактивного распада, начинающегося с U_{92}^{238} , есть распад $U_{92}^{234} \rightarrow Th_{90}^{230} + He_2^4$. В этом случае α частицы вылетают с энергией $E = 4,9$ МэВ. Так как потенциальные кривые этого распада такие же, как и в распаде U^{238} , только что рассмотренном нами (действительно, заряды ядер такие же, радиусы тоже почти одинаковые, так как относительное изменение массы ядра очень невелико), то отношение периодов полураспада U^{238} и U^{234} τ_1/τ_2 по формуле (8) приблизительно равно $\sim 10^3$. Истинный период полураспада U^{234} составляет $2,5 \cdot 10^5$ лет, следовательно, экспериментальное отношение $\tau_1/\tau_2 \simeq 10^4$. В нашем расчете мы совершенно не учитывали того, что внутренняя структура ядер U^{238} и U^{234} разная, и тем не менее ошиблись всего на порядок. Это еще раз доказывает, что время жизни ядра определяется в первую очередь именно туннельным эффектом.

ТЕРМОЯДЕРНЫЕ РЕАКЦИИ

А сейчас мы рассмотрим явление, в каком то смысле противоположное α распаду, — синтез тяжелых ядер, в котором туннельный эффект играет такую же большую роль, как и в распаде.

При α распаде масса и заряд исходного ядра уменьшаются за счет вылета из него ядра гелия. При этом выделяется довольно большая энергия. Потенциальная энергия частиц уменьшается, т е они более глубоко опускаются в соответствующих потенциальных ямах. Это значит, что возрастает энергия связи ядерных частиц, так как теперь, чтобы разделить частицы, надо затратить больше энергии. Но если потенциальная энергия уменьшается, то кинетическая энергия осколков ядра увеличивается. Эти осколки, сталкиваясь с другими частицами вещества, постепенно теряют свою кинетическую энергию, а вещество нагревается. Таким образом, кинетическая энергия продуктов реакции переходит в тепловую энергию вещества. Именно в этом смысле и говорят о выделении энергии при реакциях.

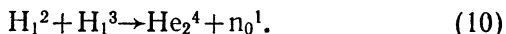
Мы рассматривали распад сложных ядер. Но возможна и реакция синтеза тяжелых ядер из более легких. В таких реакциях может выделяться очень боль-

шая энергия. Если бы удалось объединить в ядро гелия четыре протона



(при этом два протона превращаются в нейтроны, испуская положительно заряженные β -частицы — позитроны), то выделившаяся кинетическая энергия составила бы около 25 МэВ. Однако такую реакцию в земных условиях провести пока невозможно.

Более доступна и очень энергетически выгодна реакция синтеза, осуществлению которой посвящены усилия огромных научных коллективов в разных странах мира: реакция слияния тяжелого и сверхтяжелого изотопов водорода



Кинетическая энергия продуктов этой реакции составляет 17,6 МэВ, выделение энергии в несколько миллионов раз больше, чем при сжигании такой же массы водорода в кислороде. Вопрос в том, чтобы осуществить эту реакцию контролируемым образом.

Для того чтобы произошла реакция (10), ядра трития и дейтерия должны сблизиться до расстояния, на котором начинают действовать ядерные силы. На больших расстояниях ядра расталкиваются кулоновскими силами, график потенциальной энергии их взаимодействия такой же, как на рис. 1. Высота потенциального барьера, возникающего из-за кулоновского отталкивания, оказывается ~ 1 МэВ. Такова должна быть кинетическая энергия классической частицы, дейтона, чтобы он мог проникнуть к ядру трития.

Средняя кинетическая энергия частицы в газе равна $\frac{3}{2} T$. Нетрудно подсчитать, какова должна быть температура, чтобы средняя энергия частицы равнялась 1 МэВ = $1,6 \cdot 10^{-6}$ эрг.

$$T = \frac{2}{3} E_{\text{кин}}/k = \frac{2}{3} \cdot \frac{1,6 \cdot 10^{-6}}{1,38 \cdot 10^{-16}} \simeq 7 \cdot 10^9 \text{ К}$$

При такой температуре почти каждое столкновение приводило бы к ядерной реакции, однако на Земле такие условия и недостижимы, и не нужны.

Благодаря туннельному эффекту реакция становится возможной при более низких температурах. Процесс слияния ядер аналогичен α распаду, повернутому вспять во времени. При α распаде частица проникала через

барьер из ядра наружу, а при слиянии ядер дейтрон должен проникнуть через барьер снаружи внутрь ядра. Проницаемость барьера одна и та же в обоих случаях, она может быть рассчитана по формуле (6). Однако теперь ситуация меняется. Если при расчете вероятности α -распада энергия α -частицы была точно известна, то теперь нам надо оценить эффективность столкновения при произвольных энергиях сталкивающихся частиц.

Если энергия относительного движения ядер H_1^2 и H_2^2 равна E , то доля p столкновений, приводящих к реакции, определяется вероятностью туннельного проникновения через барьер

$$\omega \simeq \exp \left\{ \frac{\pi e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right\},$$

где вместо m нужно подставить эффективную массу сталкивающихся частиц $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, равную $\sim 1,2$ массы протона. Чтобы оценить долю p при всех возможных энергиях, надо умножить ω на вероятность для частицы иметь энергию $E \exp(-E/kT)$ — и просуммировать по всем возможным энергиям

$$p \sim \int \exp \left(-\frac{E}{kT} \right) \exp \left(-\frac{\pi e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right) dE.$$

Подынтегральные функции — две экспоненты — ведут себя совершенно по-разному. Первая резко убывает с энергией, и тем резче, чем ниже температура. Это значит, что чем больше энергия, тем все меньшая доля частиц имеет такую энергию. Вторая экспонента резко возрастает с увеличением энергии, так как при этом повышается вероятность туннелирования. Произведение двух экспонент — полная подынтегральная функция достигает максимума при некоторой промежуточной энергии, которую мы обозначили $E_{\text{эфф}}$. Именно с этой эффективной энергией и происходят в основном столкновения, приводящие к ядерному синтезу. Можно показать, что $E_{\text{эфф}} \sim T^{2/3}$, а доля таких столкновений

$$p \sim \exp \left\{ -\frac{\beta}{T^{1/3}} \right\}.$$

Мы видим, что доля успешных столкновений благодаря туннельному эффекту становится более мягкой функцией температуры и резко увеличивается, так что можно получить заметные величины для p уже при тем-

пературах, много меньших, чем рассчитанная нами раньше классическая температура в $7 \cdot 10^9$ К. Действительно, при температуре всего (!) в сто миллионов градусов $p \sim 10^{-4}$, т. е. каждое десяти тысячное столкновение ядер приводит к реакции, в то время как при чисто классическом процессе доля таких столкновений была бы порядка $e^{-70} \simeq 10^{-30}$.

Такие реакции принято называть термоядерными, чтобы подчеркнуть, что они могут происходить только при довольно значительном подогреве исходных реагентов. Хотя благодаря туннельному эффекту температура, при которой может пойти реакция, существенно снижается, она все-таки остается очень высокой. Вещество, нагретое до таких высоких температур, представляет собой полностью ионизованную раскаленную плазму.

Для того чтобы термоядерная проблема была решена, необходимо добиться таких условий, чтобы во время реакции поступление энергии от реакции ядерного синтеза превышало потери энергии из объема вещества, которые происходят главным образом за счет излучения.

Столкновение ядер дейтерия и трития можно характеризовать сечением столкновения — площадью того цилиндра, в котором должны лететь ядра, чтобы у них была возможность подойти на расстояние, достаточное для ядерной реакции. Это сечение σ в нашем случае составляет $\sim 10^{-24}$ см². За время t частица (дейтон) проходит расстояние vt и сталкивается со всеми ядрами трития, которые попадут в цилиндр с высотой vt и площадью основания σ . Таких ядер будет $nvt\sigma$, где n — плотность ядер трития. Из всех этих столкновений только часть, выраженная ранее введенным числом p , приведет к ядерному синтезу. Произведение $nvt\sigma p$ есть вероятность того, что ядро дейтерия вступит в реакцию за время t . Если $nvt\sigma p$ равно 1, то за время t каждое ядро дейтерия почти наверняка вступит в реакцию. Тогда за время t на каждое ядро дейтерия выделится энергия $\Delta E = 14,6$ МэВ $nvt\sigma p$. Чтобы термоядерную реакцию можно было использовать для получения энергии, ΔE должно превышать E_3 — энергию, затраченную на получение и нагрев плазмы, отнесенную на один дейтон. Отсюда можно получить так называемый критерий удержания (плазмы в нужном состоянии) в термоядерном реакторе

$$nt = \Delta E_3 / (14,6 \nu \sigma p \text{ МэВ}).$$

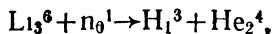
Доля столкновений, приводящих к реакции p , сильно зависит от температуры. Казалось бы, чем выше температура, тем больше p и тем меньше можно сделать критерий удержания. Однако это не так. С ростом температуры очень быстро увеличиваются потери плазмы на излучение, т. е. растет ΔE_z . Поэтому существует некоторая оптимальная температура, при которой nt получается наименьшим. Выше нее сильно растет числитель дроби ΔE_z , ниже — резко падает знаменатель за счет уменьшения p . Оказывается, что для дейтериево-тритиевой плазмы эта оптимальная температура составляет $\sim 10^8$ К, при этом $nt \simeq 3 \cdot 10^{14}$ с/см³.

С тех пор как академик И. В. Курчатов в своем историческом докладе в английском атомном центре в Харуэлле рассказал о работах, ведущихся в Советском Союзе по проблеме управляемого термоядерного синтеза, и тем самым интернационализировал эту важнейшую для всего человечества задачу, прошло 25 лет. За это время в термоядерной проблеме выработалось два направления. В одном при сохранении достаточно малой плотности плазмы ($\sim 10^{13} - 10^{14}$ см⁻³, т. е. плотность порядка нескольких миллионных долей плотности атмосферного воздуха) стараются увеличить время удержания плазмы в объеме реактора, в другом — при очень малом времени удержания ($\sim 10^{-7} - 10^{-8}$ с) увеличивают плотность плазмы.

К первому типу устройств относятся различные установки, в которых разреженная плазма удерживается магнитными ловушками. Здесь ближе всего подошли к критическому значению критерия удержания на установках типа ТОКАМАК, впервые разработанных в Институте атомной энергии им. И. В. Курчатова.

Во втором типе устройств используется иной путь получения плазмы. Маленькие шарики, наполненные дейтериево-тритиевой плазмой, сжимаются направленными со всех сторон мощными лазерными или электронными импульсами. Какое из этих направлений окажется экономически более выгодным, покажет время.

Есть в проблеме термояда еще один вопрос: где взять тяжелые изотопы водорода? Тритий, не встречающийся в природе, может быть получен в самом термоядерном реакторе, если использовать мощные потоки нейтронов.



Сейчас тритий получают с помощью нейтронов самого ядерного уранового реактора. Дейтерий присутствует в природном водороде, и его можно получить, разделив изотопы водорода. Как мы покажем в следующих разделах, в решении этой трудной технической задачи важнейшую роль играет туннельный эффект.

ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Мы рассматривали до сих пор туннелирование тяжелых частиц при экстремальных условиях — либо из атомных ядер, либо при высоких температурах термоядерных реакций. К туннелированию тяжелых частиц в других условиях — при нормальных и низких температурах — мы вернемся ниже, а сейчас займемся туннельными явлениями в мире электронов, где благодаря малой по сравнению с атомами массе туннельные явления могут проявляться чаще и заметнее.

В 1922 г. было открыто явление холодной электронной эмиссии из металлов под действием сильного внешнего электрического поля. Оно сразу поставило физиков в тупик. График потенциальной энергии электрона в этом случае изображен на рис. 7. Слева, при отрицательных значениях координаты x — область металла, в котором электроны могут двигаться почти свободно. Здесь потенциальную энергию можно считать постоянной. На границе металла возникает потенциальная стенка, не позволяющая электрону покинуть металл, он может это сделать, лишь приобретя добавочную энергию, равную работе выхода $A_{\text{вых}}$. При низкой температуре такую энергию может получить только ничтожная доля электронов.

Если сделать металл отрицательной пластиной конденсатора, приложив к нему достаточно мощное электрическое поле, то потенциальная энергия электрона из-за его отрицательного заряда вне металла начнет уменьшаться (напомним, что поле в металл проникает на очень малую глубину, на рис. 7 это не отражено). Классическая частица все равно не проникнет через такой потенциальный барьер, квантовая же вполне может протуннелировать.

Сразу после появления квантовой механики Фаулер и Нордгейм объяснили явление холодной эмиссии с

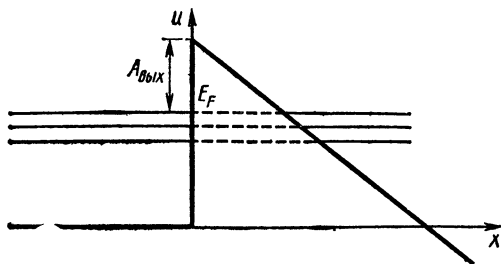


Рис 7

помощью туннельного эффекта для электронов. Электроны внутри металла имеют самые разные энергии даже при температуре абсолютного нуля, так как согласно принципу Паули в каждом квантовом состоянии может быть не больше одного электрона (с учетом спина). Поэтому число заполненных состояний равно числу электронов, а энергия самого верхнего заполненного состояния E_F — энергия Ферми в обычных металлах составляет величину порядка нескольких электронвольт, так же как и работа выхода.

Легче всего будут туннелировать электроны с энергией E_F , с уменьшением энергии вероятность туннелирования резко падает. Все экспериментальные особенности, а также полная величина эффекта прекрасно описывались формулой Фаулера—Нордгейма. Холодная электронная эмиссия — первое явление, успешно объясненное туннелированием частиц.

Надо отчетливо представлять себе, что холодная эмиссия может проявиться только в очень больших полях. Чтобы туннелирование было заметным, расстояние, которое проходит электрон под барьером, не может заметно превышать $100 \text{ \AA} \approx 10^{-8} \text{ см}$. Эта толщина барьера получится лишь в случае, когда электрическое поле будет не меньше нескольких миллионов вольт на сантиметр. Такие большие поля можно создать в конденсаторах, где одной из обкладок является тонкая нить или острие.

На туннельную эмиссию очень существенное влияние оказывают атомы или молекулы различных веществ, адсорбированные на поверхности металла. Туннельный эффект может оказаться удобным инструментом для изучения состояний таких адсорбированных частиц.

Вернемся к первым разделам, в которых было при-

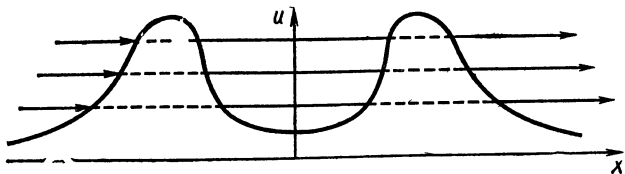


Рис 8

ведено выражение для вероятности туннелирования. Формула (6) может оказаться неверной, если две области туннелирования разделены потенциальной ямой, как это изображено на рис 8. Если проницаемость обоих барьеров мала, то электрон, помещенный внутрь ямы, будет жить в ней достаточно долго, находясь на одном из энергетических уровней этой ямы. Выход его из ямы совершенно аналогичен уже рассмотренному нами α -распаду. Однако если электрон налетает на барьер (например, слева) с энергией, равной или очень близкой к энергии уровня в центральной яме, происходит своеобразное интерференционное явление. Оба барьера, если они одинаковые, как будто уничтожаются, и электрон беспрепятственно проходит через оба (!) барьера с коэффициентом проницаемости ~ 1 . Чем точнее энергия электрона совпадает с уровнем в яме, чем точнее резонанс, тем больше проницаемость.

Резонансное туннелирование можно объяснить следующим образом. Если энергия E налетающей частицы близка к энергетическому уровню частицы в яме — E_0 , то частица может быть захвачена ямой, т. е., попав в яму, может находиться там очень долго. Ее время жизни в яме может быть найдено с помощью формулы (6) — время жизни пропорционально ω^{-1} , причем $\omega = \omega_1 + \omega_2$, где ω_1 и ω_2 — вероятности прохождения частицы через левый и правый барьеры в единицу времени. Вероятность резонансного захвата на уровень пропорциональна множителю

$$\frac{\omega_1}{\left(\frac{E-E_0}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}\right)^2}.$$

Вероятность прохождения частицы направо пропорциональна произведению вероятностей захвата и выле-

та частицы через правый барьер — w_2 . В результате для коэффициента прохождения p получаем

$$p \sim \frac{w_1 w_2}{\left(\frac{E-E_0}{\hbar}\right)^2 + \left(\frac{w_1 + w_2}{2}\right)^2}.$$

Если разница энергии налетающей частицы и уровня E_0 достаточно велика (нерезонансная ситуация), первое слагаемое в знаменателе много больше второго, тогда $p \sim w_1 w_2$, т. е. проницаемость суммы барьеров равна произведению проницаемостей каждого барьера.

Однако положение резко меняется в случае резонанса, когда E близко к E_0 . Тогда в знаменателе можно пренебречь первым слагаемым, и для p получим

$$p \sim \frac{4 w_1 w_2}{(w_1 + w_2)^2}.$$

Если барьеры, вернее проницаемости барьеров при энергии E_0 , одинаковы, то коэффициент прохождения вообще не зависит от толщин барьеров и равен 1.

Таким образом, резонансное туннельное прохождение определяется эффективностью резонансного захвата на уровень аналогично тому, как колебательный контур, настроенный в резонанс с падающей радиоволной, эффективно возбуждается, т. е. захватывает энергию этой падающей волны. Зависимость такого резонансного возбуждения от частоты волны или иначе от энергии квантов электромагнитного поля такая же, как и при захвате частицы, а вместо E_0/\hbar фигурирует собственная частота колебаний контура. Такое резонансное туннелирование может произойти, если в области электрического барьера находится адсорбированная частица, примесные атом или молекула, с которыми электрон может образовать связанное состояние. Такую частицу можно представить себе как потенциальную яму, в которой есть уровень для связанного электрона (рис 9). Налетающие из металла электроны, энергия которых совпадает с уровнем в яме, будут вылетать из металла с резко повышенной вероятностью. Зависимость числа вылетевших электронов от энергии изображена на рис 9, б. Изменяя электрическое поле, можно изменять энергии протуннелированных электронов. Подобного же рода

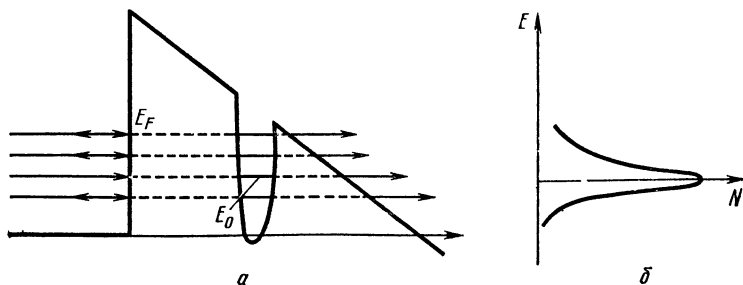


Рис 9

резонансных туннельных эффектов можно ожидать и при ионизации атомов и молекул в сильных электрических полях

ТУННЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

До сих пор, рассматривая туннелирование частиц, мы не интересовались их конечным состоянием — есть ли возможность электрону протуннелировать, не занято ли то состояние, куда попадает электрон после прохождения барьера. Так как электрон после ионизации попадает в вакуум, где других электронов нет, то конечное состояние всегда будет свободным. Но при туннелировании между металлами или полупроводниками вопрос о конечном состоянии приобретает первостепенное значение.

Напомним читателю основные положения физики твердого тела об энергетических зонах. Отдельные энергетические уровни атомов или молекул при их соединении в кристалл расщепляются в энергетические зоны. Состояния электронов в таких зонах являются коллективизированными, т. е. принадлежащими всему кристаллу. Величина расщепления уровня, т. е. ширина получившейся энергетической зоны, зависит от взаимодействия между атомами в кристалле, в частности зоны могут перекрываться. Энергетические полосы, лежащие между зонами, называются запрещенными зонами. Ни один электрон внутри кристалла не может обладать энергией, лежащей в запрещенной зоне. Если же снаружи на кристалл попадает электрон с такой энергией, то он может только туннельным образом проникнуть в кристалл, т. е. его волновая функция экспоненциально за-

тухает в глубь кристалла. Если кристалл достаточно толстый, то электрон не сможет пройти его насквозь и отразится от него.

В каждом энергетическом состоянии в кристалле, согласно принципу Паули, может находиться не более двух электронов (в соответствии с двумя возможными значениями проекции спина электрона). Энергетические зоны любого кристалла, соответствующие низшим энергетическим уровням атомов, составляющих кристалл, заполнены электронами. Эти внутренние электроны не играют почти никакой роли в свойствах кристалла.

Действительно, изменение энергии у таких электронов возможно лишь на величины в десятки и сотни электронвольт — энергетическую разницу между ближайшим свободным состоянием и энергией такого глубинного электрона. Такие изменения энергии электронов вещества бывают лишь при воздействии рентгеновских лучей или быстрых частиц, только тогда и сказываются глубокие зоны кристалла.

Для обычных свойств твердого тела, в частности для характера его поведения в электрическом поле, очень важно, совпадает или не совпадает с краем зоны наивысший заполненный уровень E_F , который называется уровнем Ферми. Если этот наивысший уровень попадает внутрь зоны, то кристалл является металлом. Если уровень Ферми попадает в запрещенную зону, то кристалл — изолятор. При небольшой ширине запрещенной зоны (обычно не более двух электронвольт) изолятор называется полупроводником.

Эти краткие сведения из теории твердого тела помогут нам понять, как происходит туннелирование электронов при контактах различных твердых тел. Сначала рассмотрим туннельный контакт двух металлов, который представляет собой структуру М—И—М (металл—изолятор—металл), изображенную на рис. 10. В качестве изолятора часто используют пленку окисла на поверхности металла, толщина которой ~ 10 Å. Теперь в качестве величины $U-E$ в выражение для вероятности туннелирования надо подставить энергетическую разность между дном зоны проводимости в изоляторе E_i и энергией туннелирующего электрона.

В состоянии термодинамического равновесия (когда тока в цепи нет) уровень Ферми должен быть одним и тем же по обе стороны контакта. Если металлы слева

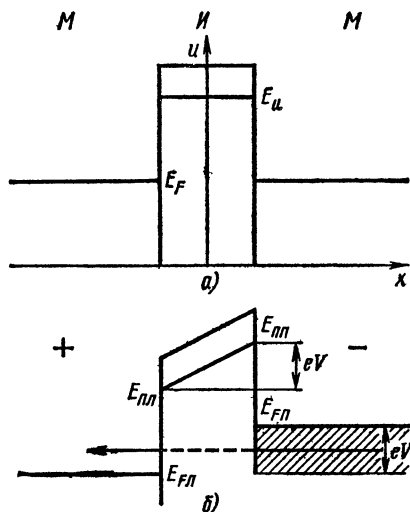


Рис 10

и справа разные, т. е. у них разные работы выхода (пусть работа выхода справа больше работы выхода слева), то слева уровень Ферми выше, $E_{Fл} > E_{Fп}$. Тогда электроны слева могут туннелировать направо, поскольку справа есть свободные состояния, на которые они могут переходить, теряют там свою избыточную энергию, и их энергия становится равной $E_{Fп}$.

Но справа электроны пойти налево не могут, так как там для них нет свободных состояний. Таким образом, справа начинают накапливаться электроны, электронейтральность нарушается, и теперь правый металл оказывается заряженным отрицательно, а левый — положительно. Этот процесс поднимает энергию электронов в правом металле до тех пор, пока уровни Ферми обоих металлов не сравняются и между металлами не установится контактная разность потенциалов.

На рис 10 для простоты справа и слева изображены одинаковые металлы. Если к контакту приложить разность потенциалов V , как это показано на рис 10, б, и замкнуть электрическую цепь, то в ней потечет ток. Теперь состояние всей системы неравновесно, и энергий Ферми в разных частях системы будет не одинаковой, $E_{Fп} > E_{Fл}$. Энергия любого электрона в правом металле увеличится на величину eV . Энергетический слой, в котором энергии электронов выше, чем $E_{Fл}$, на рис 10, б

заштрихован. Электроны справа, энергия которых принадлежит этому слою, могут туннелировать налево, так как состояния слева свободны. Электроны из левого металла, энергии которых ниже уровня Ферми $E_{\text{Фл}}$, перейти направо не могут, так как там состояния с такими энергиями заняты. Через контакт потечет туннельный ток.

Если изменить знак приложенного напряжения, то картина будет точно такой же, т. е. вольт-амперная характеристика туннельного контакта симметрична.

От чего зависит величина туннельного тока? Во первых, она, конечно, пропорциональна проницаемости барьера, которую можно рассчитать по формуле (6). Во вторых, она зависит от числа электронов, имеющих энергию, при которой они могут участвовать в туннелировании. Это число тем больше, чем больше квантовых состояний электрона приходится на этот энергетический интервал.

Число квантовых состояний, приходящееся на единичный энергетический интервал, называется плотностью состояний. Установить, как зависит плотность состояний от энергии — это основная задача спектроскопии. Поскольку туннельный ток пропорционален плотности состояний электронов, то его экспериментальное изучение позволяет судить о плотности состояний в веществах, участвующих в туннелировании. Такая связь между туннельным током и плотностью состояний является физической основой туннельной спектроскопии.

Представим себе туннельный контакт металл—изолятор—полупроводник (рис 11). Пусть при нулевом напряжении на контакт энергия Ферми в металле попадает в запрещенную энергетическую зону в полупроводнике (рис 11, а). Пока приложенное напряжение мало, так что $E_{\text{Ф}}$ еще не поднялось до зоны проводимости $E_{\text{ш}}$ в полупроводнике, тока через контакт нет (см. вольт-амперную характеристику, рис 11, в). При достижении дна зоны — напряжение на контакте V_1 — возникает ток (рис 11, б). Это значит, что энергия дна зоны нам уже известна и равна V_1 .

При дальнейшем увеличении потенциала может встретиться еще одна зона $E_{\text{ш}}'$ (вспомните, мы упоминали о перекрытии энергетических зон — это скорее правило, чем исключение). Сразу резко меняется за-

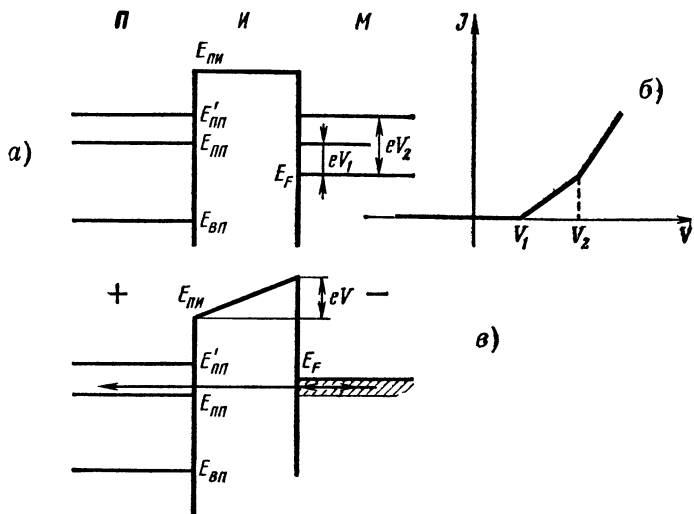


Рис 11

зависимость плотности состояний в полупроводнике от энергии — на вольт-амперной характеристике появляется характерный излом. Таким образом особенности на вольт-амперной характеристике туннельного перехода отмечают положение энергетических уровней одного из туннельных контактов, причем дают не только положение уровней, но и такую важнейшую характеристику твердого тела, как плотность состояний.

Это — первое направление в туннельной спектроскопии, когда по характеристикам туннельного тока можно изучать энергетический спектр веществ, из которых составлены оба контакта туннельного перехода. Но возможно и другое направление — изучение энергетического спектра изолятора, через который туннелируют электроны.

Если при постоянном напряжении менять промежуточный изолятор, то величина туннельного тока тоже изменится. Происходит это оттого, что меняется положение дна зоны проводимости в изоляторе. Так как в выражении для вероятности туннельного перехода энергия U стоит в показателе экспоненты, уже небольшое ее изменение сильно скажется на туннельном токе. Был проделан эксперимент, когда промежуточный изо-

лятор содержал ферромагнитные атомы, т е его электронная структура могла изменяться под действием магнитного поля При наложении магнитного поля было отмечено заметное изменение туннельного тока, связанное с изменением положения зоны проводимости в изоляторе

Ко второму направлению в туннельной спектроскопии относится явление туннельного возбуждения различных колебаний в изоляторе Пусть мы увеличили разность потенциалов так, что разность в энергиях между уровнем Ферми и дном зоны проводимости слева становится равной энергии какого-нибудь колебания, собственного материалу изолятора, $\hbar\omega$ Тогда электрон с энергией, близкой к E_F , туннелирующий через изолятор, может возбудить это колебание и выйти в левую сторону с энергией, равной $E_F - \hbar\omega$ Следовательно, этот электрон, во-первых, после туннелирования попадает в свободные состояния вблизи дна зоны левого кристалла — полупроводника, где плотность состояний невелика Во-вторых, электрон туннелирует с меньшей энергией, т е. вероятность туннелирования также уменьшается Это значит, что туннельный ток уменьшается и на вольт-амперной характеристике появляется провал

Нетрудно видеть, что в действительности здесь происходит возбуждение колебаний за счет энергии электрического поля, приложенного к туннельному переходу, а напряжение, при котором происходит изменение туннельного тока, позволяет определить положение колебательного энергетического уровня

Туннельная спектроскопия может помочь определить уровни возбуждения различных примесей, попавших в область туннельного перехода Если внутри изолирующего промежутка окажутся примесные атомы и энергия связи электрона с этими атомами попадет в область энергий, с которыми туннелируют электрон, то возможно увеличение тока за счет резонансного туннелирования, о котором речь шла выше Энергетический уровень на примеси смещается по отношению к уровням в контактах при наложении электрического поля Когда этот уровень совпадает с энергией туннелирующего электрона, на вольт-амперной характеристике контакта появляется пик По положению этого пика можно определить энергию связи электрона на примеси.

В недавней работе И. М. Лифшица и В. Я. Кирпи-

ченкова было показано, что в достаточно толстых туннельных переходах со случайно расположенными примесями, на которых могут рассеиваться электроны, туннельный ток будет определяться главным образом такими конфигурациями в расположении примесей, при которых возможно резонансное туннелирование

ТУННЕЛИРОВАНИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Туннелирование в полупроводниках обладает рядом очень интересных особенностей, в первую очередь обусловленных тем, что электрические и магнитные свойства полупроводников можно менять в широких диапазонах, добавляя в них различные примеси. Кроме того, эффективные массы электронов в полупроводниках, как правило, значительно меньше массы свободного электрона, поэтому туннелирование здесь может происходить на более далекие расстояния, чем через вакуум или изолятор. Последнее требует пояснения.

Дело в том, что электроны в кристаллах движутся в периодической решетке ионов, взаимодействуя с ними и друг с другом. Поэтому, когда мы говорим о свободном движении электрона, имеющего энергию в разрешенной зоне, это не значит, что электрон по настоящему свободен. Он беспрепятственно переходит от узла к узлу в кристаллической решетке, но не все его характеристики совпадают с характеристиками свободного электрона. Так, заряд его остается прежним, однако зависимость между кинетической энергией $E_{кин}$ и импульсом p меняется. Если у электрона в пустоте $E_{кин} = p^2/2m_0$, то для электрона в кристалле такая зависимость в общем не обязательна. Там же, где она возможна, коэффициент пропорциональности между $E_{кин}$ и p^2 и есть $1/2 m_{эфф}$. В полупроводнике GaAs $m_{эфф} = 0,066 m_0$.

В полупроводник можно добавлять различные типы примесей. Те, которые могут отдавать электроны в незаполненную зону проводимости, называются донорами или n примесями, те же, которые захватывают электроны из заполненной валентной зоны, называются акцепторами или p примесями. Электронные уровни примесей лежат в запрещенной зоне. С энергией, лежащей в запрещенной зоне, электрон не может свободно двигаться по кристаллу, но быть связанным и локализованным около примеси вполне может. Конечно, такая отдача

или захват электрона будут происходить только при достаточном нагреве полупроводника, но уже при комнатных температурах для многих примесей такой процесс происходит. Тогда в области, где сконцентрированы p примеси (p области) полупроводника, будут возникать пустые места в валентной зоне, а в n области (с n -примесями) — электроны в зоне проводимости

Что произойдет, если очень близко друг к другу поместить p и n области полупроводника, т. е. создать очень резкий p — n переход? Тогда электроны из n области начнут проникать в p область (иначе можно сказать, что электроны с доноров в n области будут переходить на акцепторы в p области). При этом n область начнет заряжаться положительно, а p область — отрицательно. Следовательно, электронные уровни в p -области поднимутся, а в n -области опустятся, энергетические зоны изогнутся (рис 12). (Картина заполнения энергетических уровней в полупроводнике, изображенная на рис 12, соответствует очень большим концентрациям примесей.) Перетекание электронов из n области в p -область будет продолжаться до тех пор, пока не установится единый уровень Ферми по всей системе — единая граница свободных состояний. Тогда наступит равновесие. В области p — n перехода возникает сильное электрическое поле (направленное на рис 12 справа налево).

Разность потенциалов $V_{\text{вн}}$ может быть больше ширины запрещенной зоны, т. е. $V_{\text{вн}} > 1\text{В}$. Ширина p — n -перехода, который обычно приготавливают, сплавляя два полупроводниковых стержня с разными примесями, составляет $\sim 100 \text{ \AA} = 10^{-6} \text{ см}$. Таким образом, поле оказывается $\sim 10^6 \text{ В/см}$. В таких мощных полях в области p — n -перехода могут происходить весьма интенсивные туннельные переходы электронов.

Здесь мы встречаемся с туннельным переходом внутри кристалла. Как мы уже говорили, движение электрона в запрещенной зоне невозможно, т. е. волновая функция его затухает с расстоянием внутри запрещенной зоны. Пусть электрон движется из зоны проводимости справа (рис 12, а). Его распространение в виде незатухающей волны возможно только до точки a , дальше налево его волновая функция затухнет аналогично тому, как она затухает внутри барьера на рис 7. Ширина барьера равна расстоянию между точками a и b ,

ера Обратим внимание, что при таком внутрикристаллическом туннелировании ширина барьера не зависит от энергии электрона

Но в равновесии число электронов, туннелирующих в обе стороны, одинаково, поэтому тока нет. Приложим к туннельному диоду (так называется p — n -переход, на котором возможно туннелирование) внешнее поле в прямом направлении, т. е. минус — к n области, а плюс — к p области. В этом случае внешнее поле противоположно внутреннему. Тогда смещение зон уменьшается (см. рис. 12, б) и часть занятых состояний в n -области перекрывается с незанятыми состояниями в p -области. Электроны туннелируют налево, ток пропорционален вероятности туннелирования, плотности занятых состояний справа и незанятых состояний слева.

При дальнейшем увеличении внешней разности потенциалов перекрытие уровней справа и слева достигает максимума, затем часть занятых состояний в n -области начинает перекрываться с запрещенной зоной — для электронов на этих уровнях прямое туннелирование невозможно, им некуда переходить (рис. 12, в). Наконец, дно зоны проводимости справа поднимется так высоко, что попадет в область энергий запрещенной зоны слева. При этом ток должен полностью прекратиться (рис. 12, г). При дальнейшем увеличении напряжения занятые уровни в n -зоне начинают совпадать с незанятыми уровнями в зоне проводимости p -зоны (рис. 12, д). Электроны проходят справа налево без всякого туннелирования, ток сильно растет. Вольт-амперная характеристика изображена на рис. 12, е (данные из работы Эсаки).

Что примечательного в вольт-амперной характеристике туннельного диода? В интервале напряжений от V_1 до V_2 ток падает с увеличением напряжения, т. е. на этом участке дифференциальное сопротивление dI/dV отрицательно. Если на диоде поддерживать напряжение между V_1 и V_2 , то диод работает как активный, а не как пассивный элемент цепи. Включение в цепь пассивного элемента (элемента с обычным положительным сопротивлением) приводит к затуханию колебаний в цепи, а активный элемент в цепи способствует раскачке колебаний.

Туннельный диод можно сделать очень малых размеров, кроме того, он малоинерционен и поэтому является

идеальным элементом для микроволновых генераторов

Полупроводниковый туннельный диод используется и для изучения энергетического спектра колебаний в самом полупроводнике. Поглощение или испускание фонона — колебательного кванта энергии в кристалле, которое происходит в области туннельного перехода, резко меняет энергию туннелирующего электрона, а следовательно, и туннельный ток. Провалы и всплески на вольт-амперной характеристике при eV , соответствующем энергии фононов, позволяют не только измерить их энергию, но и судить о такой тонкой характеристике, как величина электрон-фононного взаимодействия.

Как видим, тщательное изучение туннельного эффекта в различных системах позволяет не только объяснить сложные физические явления, но и использовать их в исследованиях (туннельная спектроскопия) и в технике (генераторы на туннельных диодах).

Туннельные диоды были изобретены японским физиком Л. Эсаки в 1957 г., за что в 1974 г. ему была присуждена Нобелевская премия по физике.

В заключение этого раздела расскажем о том, как электрическое поле кристалла может менять спектр поглощения или испускания электромагнитных волн. Для любой квантовой системы спектр поглощения (и испускания) определяется разностью энергий состояний, между которыми под действием электромагнитного поля происходит переход.

Для отдельных атомов и молекул уровни дискретны, поэтому спектры тоже дискретны — так называемые линейчатые спектры газов, где каждый атом независимо поглощает или испускает кванты электромагнитной энергии.

В твердых телах переходы могут происходить между уровнями одной или разных зон. Тогда, поскольку энергетические уровни в зоне чрезвычайно близки друг к другу, спектр поглощения и испускания сплошной. В металлах, где сразу же над уровнем Ферми лежат незаполненные электронные состояния, спектр поглощения начинается с нулевой частоты, в изоляторах наименьшая частота поглощения определяется шириной запрещенной зоны $\hbar\omega = G$. Такая картина будет наблюдаться в кристалле без примесей при очень низкой температуре. Если температура отлична от нуля, то часть кристаллических колебаний возбуждена. Электрон может

одновременно поглотить электромагнитный квант — фотон и фонон, если только сумма их энергий больше ширины запрещенной зоны, $\hbar\omega_{\text{фот}} + \hbar\omega_{\text{фон}} > G$. Это значит, что при частотах, меньших G/\hbar , будет наблюдаться поглощение, интенсивность которого κ пропорциональна числу фононов допустимой энергии, имеющих в кристалле, т. е.

$$\kappa(\omega) \sim \exp\left\{-\frac{G-\hbar\omega}{kT}\right\}$$

Согласно представлениям квантовой механики электромагнитные переходы возможны, только если волновые функции начального и конечного состояний перекрываются, т. е. в некоторой области пространства они одновременно отличны от нуля. В общем случае интенсивность таких переходов тем больше, чем заметнее такое перекрытие. Мы уже видели, что при наложении электрического поля энергетические зоны изгибаются. В той области пространства, где поле отлично от нуля, зоны наклонны. Здесь одновременно отличны от нуля волновые функции и начального (в валентной зоне), и конечного (в зоне проводимости) состояний электрона, разность энергий между которыми меньше G (см. рис. 12, а, где схематически изображено поведение волновых функций этих состояний, отмеченных как ψ_n и ψ_k). Следовательно, между валентной зоной и зоной проводимости возможен переход с поглощением кванта света, энергия которого меньше G .

Интенсивность такого поглощения определяется туннельным проникновением в область запрещенной зоны. Коэффициент поглощения будет экспоненциально увеличиваться с ростом электрического поля и уменьшаться с увеличением разности частот $G/\hbar - \omega$. Последнее связано с тем, что чем больше разница частот, тем больше расстояние туннелирования, обеспечивающее перекрытие волновых функций.

Мы изложили физическую сущность эффекта, известного под названием эффекта Франца—Келдыша. Он был независимо предсказан в 1958 г. немецким физиком В. Францем и советским физиком Л. В. Келдышем, а затем подтвержден экспериментально.

Эффект Франца—Келдыша можно отличить на эксперименте от поглощения с участием фононов, так как

первый не зависит от температуры Мы рассмотрели этот эффект для межзонных переходов электронов Но такой же эффект можно наблюдать и для фотоионизации примеси, когда квант света открывает электрон, например, от акцепторной примеси и забрасывает его в зону проводимости Если примеси попали в область сильного электрического поля, как это изображено на рис 12, а, квант света с частотой, меньше энергии ионизации примеси $E_{\text{ион}}$, может забросить электрон с примеси на конечное состояние с энергией E_k' в зоне проводимости

ТУННЕЛИРОВАНИЕ МЕЖДУ ПРИМЕСЯМИ

В твердом теле возможно туннелирование электронов не только такое, при котором конечным состоянием электрона является зонное состояние Много работ в последнее время посвящено экспериментальному и теоретическому изучению туннельного переноса электрона между двумя локализованными состояниями Обычно электроны локализуются на различных нарушениях кристаллической решетки Это могут быть химические примеси, т е атомы или молекулы, отличные от атомов или молекул, из которых построен кристалл, или, как говорят, «вещество хозяин» Это могут быть и разнообразные дефекты кристаллической решетки, либо получившиеся при образовании кристалла, либо внесенные в него благодаря внешним воздействиям Таким воздействием может быть облучение быстрыми электронами, нейтронами или γ -квантами, создающее так называемые радиационные нарушения материала вакансии — отсутствие атома на узле, где он должен был находиться в правильной решетке, междоузельные атомы и тому подобное Определенного рода нарушения вносятся в кристалл, если он подвергается пластической деформации Тогда в нем возникают дислокации — линейные (а не точечные) нарушения кристаллического порядка

Примесь в кристалле часто становится ловушкой для электронов, если их уровни на примеси лежат ниже дна зоны проводимости Электроны, каким либо образом попавшие в зону проводимости, довольно быстро будут захвачены такими примесными ловушками После этого начнется более медленное перераспределение электронов между ловушками,

Если температура достаточно высока, такое перераспределение происходит путем теплового возбуждения электронов примесь ионизуется, электрон при этом переходит в зону проводимости, затем он свободно движется по зоне, пока не будет захвачен какой-нибудь другой примесью. Скорость такого процесса как правило определяется вероятностью термоактивации, пропорциональной $\exp(-E_{\text{ион}}/kT)$, где $E_{\text{ион}}$ — энергия ионизации примеси. Такую зависимость в химии называют законом Аррениуса, а $E_{\text{ион}}$ — энергией активации в этом законе.

При низких температурах, когда аррениусовская экспонента очень мала, вступает в действие туннельный механизм переноса электрона от одного атома примеси к другому. Вероятность такого переноса, как мы уже знаем, экспоненциально зависит от энергии ионизации и расстояния между атомами примеси (см формулу (5))

$$\omega \simeq \omega_0 \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE_{\text{ион}}} r\right\}.$$

Здесь коэффициент ω_0 есть аналог частоты столкновений α -частицы со стенкой ямы в α -распаде. Чем выше плотность примесей, т. е. чем ближе атомы примеси расположены друг к другу, тем эффективнее туннельный перенос. Однако теперь вероятность переноса становится еще более сложной и резкой функцией энергии, поскольку ω_0 начинает зависеть от энергии.

При туннельном переносе должен выполняться закон сохранения энергии. Энергии же связи электрона на примеси-доноре E_1 и на примеси-акцепторе E_2 как правило не совпадают, так как это либо разные атомы или ионы, либо разного сорта дефекты кристаллической решетки. Тогда разница в энергиях $\Delta = E_2 - E_1$ должна быть передана кристаллической решетке. (Мы рассматриваем случай низких температур, когда электрон переходит на более низкий энергетический уровень, т. е. энергия связи $E_2 > E_1$.)

Те степени свободы кристалла, на которые переходит энергия Δ , являются чаще всего либо внутримолекулярными, либо кристаллическими колебаниями, с которыми может быть связан электрон на доноре и на акцепторе. Так как довольно часто энергия Δ оказывается заметно больше энергии одного колебательного кванта, то при

туннельном переходе должны сильно возбуждаться соответствующие колебательные степени свободы. Вероятность такого возбуждения зависит от величины электрон-колебательного взаимодействия в доноре и акцепторе, которая может резко меняться от атома к атому. Поэтому для разных сортов доноров и акцепторов вероятности туннельных переходов ω могут отличаться на много порядков, хотя их энергии связи E_1 и E_2 близки друг другу. Экспериментально обнаружены изменения ω_0 от 10^3 до 10^{15} с⁻¹.

Перенос электрона от примеси к примеси чаще всего обнаруживают по изменению сигнала электронного парамагнитного резонанса. Изучаемый кристалл помещают в постоянное магнитное поле. В магнитном поле электрон может находиться в двух состояниях, отвечающих двум возможным направлениям своего спинового магнитного момента — по полю и против поля. Это состояния с разными энергиями. Если перпендикулярно постоянному полю приложить переменное магнитное поле с частотой ω такой, что $\hbar\omega$ близко к разности энергий этих двух состояний электрона, то энергия переменного поля будет поглощаться системой спинов. Поглощение энергии переменного поля может быть отмечено, например, по изменению добротности контура. Частоты электронного парамагнитного резонанса на доноре и акцепторе могут заметно отличаться из-за разной величины эффективного магнитного момента электрона на этих примесях. При туннелировании сигнал от доноров будет постепенно уменьшаться, а от акцепторов — увеличиваться.

Если электроны туннелируют между примесями с большой разницей энергии связи, возможно интересное явление — изменение характерной энергии туннелирования в зависимости от расстояния между примесями. Этот эффект можно объяснить следующим образом.

Энергия Δ по-разному распределяется между колебаниями на донорной и акцепторной примесях. Если на доноре выделилась энергия Δ_1 , это значит, что электрон передал донору эту энергию, после чего он туннелирует так, как будто его энергия связи увеличилась и стала $E_1 + \Delta_1$ (он как будто глубже «зарылся» в донорную яму). На акцепторе тогда выделится энергия $\Delta_2 = \Delta - \Delta_1$. Множитель ω_0 перед экспонентой, как правило, резко (тоже экспоненциально) зависит от энергий

Δ_1 и Δ_2 При заданном расстоянии между донором и акцептором электрон может протуннелировать многими способами Энергии Δ_1 и $\Delta_2 = \Delta - \Delta_1$, выделяющиеся на доноре и акцепторе, соответственно могут быть разными, при этом и энергия туннелирования электрона разная Каждому расстоянию r отвечает свое распределение энергии Δ между донором и акцептором, при котором вероятность ψ максимальна

Чем больше r , тем меньше может быть эффективная энергия связи $E_1 + \Delta_1$ Если на доноре до туннелирования была сосредоточена колебательная энергия, то эффективная энергия связи может уменьшиться, когда электрон заберет у донора часть энергии (этот случай соответствует отрицательным значениям Δ_1) Эта энергия затем выделится на акцепторе

Таким образом, чем больше расстояние, на которое должен туннелировать электрон, тем большая энергия выделяется на примеси — акцепторе После акта переноса электрона и выделения колебательной энергии на акцепторе она быстро переходит в решеточные колебания вблизи акцептора, т. е. в тепло Таким образом туннельный перенос электрона на большие расстояния сопровождается переносом тепла от донора к акцептору

Довольно часто разница энергий электрона на доноре и акцепторе слишком велика, так что она не может выделиться в одном акте переноса В таком случае эта энергия Δ может быть испущена в виде одного фотона Такое явление испускания света при туннельном переходе электрона с одной примеси на другую носит название туннельной люминесценции Если при обычном испускании фотона происходит переход электрона с верхнего возбужденного уровня на более низкий в одном и том же атоме, то при туннельной люминесценции электрон на верхнем и нижнем уровне локализован на разных атомах Вероятность туннельной люминесценции по порядку величины равна вероятности обычной люминесценции, умноженной на вероятность туннелирования Поэтому вероятность туннельной люминесценции очень мала, и это явление часто бывает довольно трудно заметить

Туннельная люминесценция — это новый раздел оптической спектроскопии Изучение спектра излучения позволяет изучать энергетическую структуру примесных

центров, о которых очень трудно получить подобную информацию другими способами

Туннельный перенос электрона с точки зрения химика — это протекающая без непосредственного контакта реагентов окислительно восстановительная реакция. Такие реакции играют существенную роль в биологических системах, когда электроны переносятся, например, между ионами железа Fe^{+3} и Fe^{+2} , расположенными в центрах сложных молекул гемоглобина, такие реакции входят в цепь биохимических реакций дыхания. При этом электроны переносятся на расстояния в десятки ангстрем — есть основания полагать, что перенос происходит по туннельному механизму.

Экспериментальные и теоретические закономерности переноса электронов между примесями в твердых телах, туннельной люминесценции активно изучаются советскими физиками в Институте химической физики АН СССР, в научных учреждениях Академий наук Латвийской и Эстонской ССР. Очень интересное явление, связанное с туннелированием электронов в кристаллах, было открыто недавно в Институте физики твердого тела АН СССР в экспериментах С. З. Шмурака и С. И. Бредихина. Опишем коротко его суть.

Мы уже говорили выше, что электроны довольно часто локализуются на различных нарушениях кристаллической решетки. В частности, они могут захватываться дислокациями. Таким образом, дислокация становится заряженной, а так как дислокация — это линейный дефект в кристалле, который может иметь довольно большую, даже макроскопическую длину (много тысяч постоянных кристаллической решетки), то это значит, что в кристалле появляются длинные заряженные нити. Электрическое поле около них может достигать миллионов вольт на 1 см. Тогда вблизи дислокаций энергетические зоны кристалла должны изгибаться подобно тому, как это происходит в туннельных диодах. Примеси, находящиеся на расстоянии не более нескольких десятков ангстрем от дислокации и захватившие электроны на свои уровни, могут быть ионизованы двояким образом: тепловым и туннельным.

В первом случае электрон, локализованный на примеси, может под действием теплового возбуждения увеличить свою энергию и перейти в зону проводимости в том же месте, где находится примесь. Второй путь

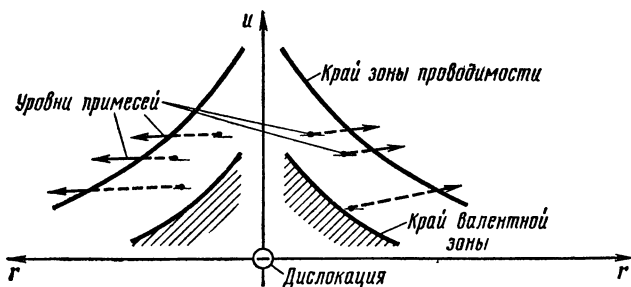


Рис 13

ионизации не требует теплового возбуждения, электрон может туннельно перейти в зону проводимости вблизи дислокации (рис 13). При низких температурах, когда вероятность теплового возбуждения мала, туннельная ионизация будет преобладающей.

Если подвергнуть кристалл большим механическим нагрузкам, то он может пластически деформироваться. Не вдаваясь в микроскопическое описание процесса пластической деформации, скажем только, что она связана с движением дислокаций*. Каждая заряженная дислокация при своем движении будет туннельным образом «выметать» электроны с примеси в зону проводимости. Именно такое явление и было обнаружено С. З. Шмураком и С. И. Бредихиным.

В кристалле ZnS с примесью Cu они наблюдали люминесценцию, которая происходила во время пластической деформации, причем спектр излучения соответствовал излучению возбужденного атома Cu в кристалле. В поле дислокации электрон с атома Cu выходит в зону проводимости $\text{Cu} \rightarrow \text{Cu}^+ + e^-$, затем, после того как дислокация отойдет, происходит захват электрона на ион Cu^+ , в основном на возбужденный уровень $\text{Cu}^+ + e^- \rightarrow \text{Cu}^*$, а затем дезактивация с испусканием кванта света $\text{Cu}^* \rightarrow \text{Cu} + h\nu$. Чем больше механическая нагрузка на кристалл, тем быстрее движутся дислокации, тем более часты такие процессы, тем интенсивнее люминесценция. Таким образом, туннелирование электронов способствует преобразованию механической энергии деформации в свет.

* Прекрасное популярное описание связи деформации с движением дислокаций дано в книге Дж. Гарднера «Почему мы не проваливаемся сквозь пол», М., Мир, 1971.

ТУННЕЛЬНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Исключительно красивые и интересные явления были обнаружены, когда стали изучать туннелирование электронов через барьер из изолятора, по одну или по обе стороны которого находится металл в сверхпроводящем состоянии

Явление сверхпроводимости было открыто голландским физиком Камерлинг-Оннесом в 1911 г. Наиболее поразительное его проявление состоит в том, что при температурах, близких к абсолютному нулю (обычно несколько градусов Кельвина), электрическое сопротивление некоторых металлов полностью исчезает (в последнее время получены сплавы, для которых температура перехода в сверхпроводящее состояние больше 20 К)

Микроскопическая теория этого явления была дана только в 1957 г. американскими физиками Бардиным, Купером и Шриффером. Суть ее очень кратко состоит в следующем. Электроны в металлах взаимодействуют друг с другом двояким образом. Во-первых, они отталкиваются, как одноименно заряженные частицы. Это отталкивание действует только на малых расстояниях между электронами, а на больших расстояниях оно экранируется другими электронами металла. Во-вторых, электроны взаимодействуют с колебаниями решетки и могут как бы обмениваться колебательными квантами — фононами. Такой обмен приводит к притяжению между электронами, которое сильнее кулоновского отталкивания между электронами.

Согласно теории при достаточно низких температурах в металлах, где имеется много электронов, занимающих все энергетические состояния вплоть до энергии Ферми, такое притяжение приводит к кардинальной перестройке энергетического спектра электронов. Они образуют связанные состояния — пары, которые все движутся по кристаллу самосогласованным, коррелированным образом. Энергия связи пары электронов Δ мала, в температурной шкале она соответствует нескольким градусам. Вблизи энергии Ферми образуется щель в плотности состояний. Электроны заполняют все состояния, энергия которых меньше $E_F - \Delta/2$, а свободные состояния для электронов соответствуют тому, что одна из

пар разорвана, т е энергия ближайшего пустого состояния равна

$$E_F - \frac{\Delta}{2} + \Delta = E_F + \frac{\Delta}{2}.$$

Коррелированное движение всего коллектива электронов не может быть разрушено местными столкновениями с отдельными фононами решетки, поэтому возможен незатухающий электрический ток В нормальном же металле, где электроны движутся почти независимо друг от друга, столкновение с отдельным фононом может привести к рассеянию электрона, к потере энергии, поэтому энергия электрона, полученная им в электрическом поле, будет переходить в тепло — ток испытывает сопротивление При повышении температуры тепловые флуктуации нарушают корреляцию в движении электронов, и при некоторой температуре перехода сверхпроводящее состояние разрушается

Туннелирование электронов в сверхпроводниках открыл в 1961 г норвежский физик И Гиавер, работавший в США Будучи инженером, он для повышения образования одновременно с работой в лаборатории фирмы «Дженерал электрик» слушал курс физики В своей лекции, прочитанной при вручении ему Нобелевской премии за это открытие, Гиавер вспоминает «Представление о том, что частица может проходить через барьер, казалось мне чем-то удивительным Для инженера весьма странно звучит утверждение, что если вы будете бросать теннисный мяч в стену достаточное число раз, то он в конце концов пройдет сквозь стену, не разрушив ее и не разрушившись сам Да, трудный путь лежит к Нобелевской премии!»

Схема эксперимента Гиавера изображена на рис 14 Нормальный металл, алюминий (слева), отделен от сверхпроводника, свинца, изолятором (пленка окисла Al_2O_3), заштрихованы заполненные энергетические уровни Температура сверхпроводящего перехода в Al — 1,2 К, а в Pb — 7,2 К, поэтому при промежуточных температурах будет как раз такой туннельный контакт. В равновесии уровень Ферми E_F одинаков по обе стороны контакта, тока нет (а) Если к контакту приложено напряжение V (минус — на металл), то уровень E_F в металле поднимается, однако до тех пор, пока сдвиг eV не станет равным $\Delta/2$, тока не будет, так как

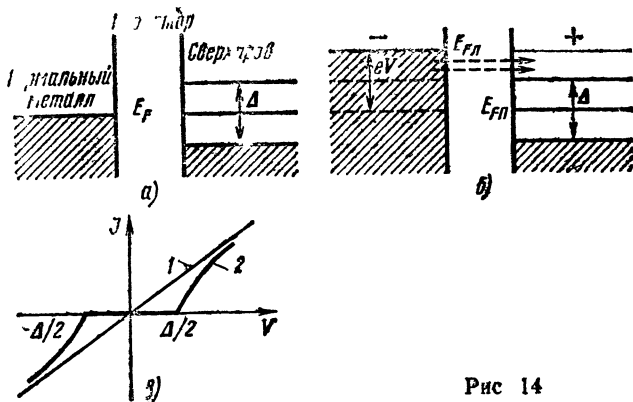


Рис 14

туннелирующие электроны должны попадать в область энергий, занятую энергетической щелью и поэтому запрещенную для электронов в сверхпроводнике (б). Точно то же самое будет происходить при изменении знака потенциала, только теперь электроны будут туннелировать из сверхпроводника в металл. Вольт-амперная характеристика перехода будет иметь вид кривой 2, изображенной на рис 14, в

Сверхпроводимость разрушается не только при повышении температуры, но и под действием достаточно сильных магнитных полей. И в эксперименте Гиавера, как только магнитное поле достигало критической величины, вольт-амперная характеристика приобретала вид кривой 1, такой же, как для туннельного контакта нормальных металлов.

Туннелирование позволяет очень точно измерять энергетическую щель в сверхпроводнике, ее зависимость от внешних условий, от состава сверхпроводника. Такие эксперименты, как мы уже говорили в разделе о туннельной спектроскопии, позволяют изучать важнейшую характеристику сверхпроводников — плотность состояний вблизи уровня Ферми. Более сложные вольт-амперные характеристики можно получить при туннельном контакте двух сверхпроводников, когда туннелируют электроны, из-за теплового возбуждения находящиеся на уровнях выше щели, т.е. нормальные, а не сверхпроводящие спаренные электроны.

Однако возможно и туннелирование сверхпроводя-

щих электронов, т. е. через тонкий слой изолятора, разделяющий два сверхпроводника, может течь незатухающий сверхпроводящий ток. Для того чтобы это было возможно, электроны из левого и правого сверхпроводников должны взаимодействовать и образовывать пары. Это достижимо в той мере, в которой электрон может протуннелировать через барьер. Можно сказать, что из полного числа n электронов, подлетающих к поверхности раздела слева, лишь $p \cdot n$ (здесь p — туннельная проницаемость барьера) образуют пары с электронами правого сверхпроводника и дадут сверхпроводящий туннельный ток. Самое главное, что этот ток пропорционален проницаемости барьера для одного электрона, а не для двух, как может показаться на первый взгляд. Поэтому при толщинах барьера ~ 10 Å (несколько атомных слоев) он может быть вполне наблюдаем.

Сверхпроводящий ток течет через барьер без всякой разности потенциалов на барьере. Если же приложить к туннельному переходу разность потенциалов V , то туннельный сверхпроводящий ток будет переменным с частотой колебаний $\omega = 2eV/\hbar$. Сверхпроводящие электроны в металле описываются квантовым состоянием, единым для всей системы. При туннельном переходе пары электронов их энергия меняется на величину $E_2 - E_1 = 2eV$. Поскольку в веществе, по которому течет сверхпроводящий ток, энергия не рассеивается, здесь происходит переход между двумя квантовыми состояниями именно с такой разницей энергий. Но при квантовых переходах между двумя состояниями вероятность пребывания системы в каждом из них осциллирует со временем. Это значит, что и ток должен осциллировать с частотой

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{2eV}{\hbar}.$$

В обычном проводнике такие осцилляции наблюдать не могут, так как электроны в них движутся независимо, осцилляции их тоже независимы и, складываясь, усредняются.

Осцилляции сверхпроводящего тока, как и всякие осцилляции тока, должны сопровождаться излучением электромагнитных волн той же частоты $\omega = 2eV/\hbar$. Такое излучение сверхпроводящего туннельного диода было впервые экспериментально обнаружено в 1965 г. харь-

ковскими физиками И К Янсоном, В М Свистуновым и И М Дмитриенко

Возможность существования туннельного сверхпроводящего тока, как постоянного, так и переменного, была теоретически предсказана английским физиком Б Джозефсоном в 1962 г Это явление получило название эффекта Джозефсона Интересно отметить, что работа, за которую Б Джозефсон впоследствии получил Нобелевскую премию, была дипломной работой молодого физика

Эффекту Джозефсона посвящено большое число теоретических и экспериментальных работ Джозефсоновский туннельный ток очень чувствителен к изменению магнитного поля, и на основе этого были созданы приборы, способные измерять магнитные поля или разности потенциалов с высочайшей точностью Чувствительность джозефсоновских магнитометров составляет 10^{-8} Гс (напомним, что магнитное поле Земли $\sim 0,5$ Гс), а гальванометров $\sim 10^{-14}$ В! С помощью нестационарного эффекта Джозефсона с наибольшей в настоящее время точностью измерено отношение фундаментальных констант e/h . Туннельный сверхпроводящий ток находит все большее применение как в измерительной технике, так и в различных электронных приборах — СВЧ-генераторах, СВЧ-усилителях, преобразователях частоты и т п

ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ В ХИМИИ

До сих пор мы рассматривали в основном туннелирование электронов в различных средах. Только в ядерных реакциях решающее значение имело туннелирование тяжелых частиц, так как расстояния туннелирования там настолько малы, что такое туннелирование могло существенно влиять на процесс (α распад или синтез ядер). Долгое время считалось, что, поскольку в химических реакциях тяжелые частицы — атомы или ионы — должны перемещаться от молекулы к молекуле на расстояния порядка ангстрема (10^{-8} см), намного большие, чем в ядерных реакциях ($\sim 10^{-12}$ см), туннелирование тяжелых частиц через потенциальные барьеры не будет заметно сказываться на ходе химических реакций

В последнее время все больше внимания уделяется

изучению химических реакции при низких температурах, и тут то туннельный эффект начинает выступать на первый план. В химических реакциях скорости тяжелых ядер, входящих в состав молекул, гораздо меньше, чем скорости электронов. Поэтому электроны успевают подстраиваться под движение ядер. Иными словами, при любом положении ядер в системе можно говорить об электронной энергии в системе, которая зависит от координат всех ядер, $U_e(R_1, R_2, \dots, R_n)$. Эта электронная энергия зависит от того, в каком квантовом состоянии находились электроны в атомах и молекулах, прежде чем они сблизилась на расстояния, при которых начинается перегруппировка атомов в новые молекулы, где происходит химическая реакция. Как правило, энергии электронов в разных состояниях отличаются по величине и по разному ведут себя при изменении координат ядер. Электронную энергию $U(R_1, \dots, R_n)$ называют электронным термом системы. Вместе с кулоновской энергией взаимодействия ядер между собой электронная энергия U_e составляет полный терм системы $U(R_1, \dots, R_n)$ — энергию, зависящую только от взаимного положения ядер. Такую энергию можно трактовать как потенциальную энергию системы ядер, в которой они движутся, сталкиваются, так что сохраняется полная энергия — сумма потенциальной и кинетической.

Терм системы, особенно если в ней много атомов, очень сложная функция многих координат. Рассчитать его чрезвычайно трудно. Даже сейчас, когда в распоряжении физиков имеются мощные электронные вычислительные машины, можно по пальцам перечислить системы, для которых рассчитаны термы, да и то только для нескольких электронных состояний. Однако качественное поведение термов на основе расчетов и эксперимента установить гораздо легче. Самая большая трудность — описание сложной химической реакции, в которой происходит изменение связей многих атомов, может быть обойдена, так как она обычно может быть разбита на отдельные этапы, при которых меняется положение только одного атома. Тогда надо рассматривать терм как функцию только координаты этого атома, которую называют координатой реакции.

Пример типичной зависимости терма от координаты реакции приведен на рис. 15, где условно область координаты слева — область реагентов (реакция еще не

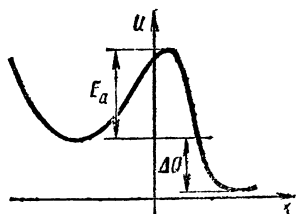


Рис 15

произошла), справа — область продуктов реакции. Характерным является потенциальный горб (или барьер) в переходной области. На рис 15 приведен пример экзотермической реакции, в результате которой может выделяться тепловая энергия. Тепловой эффект реакции равен разности энергий терма до и после реакции.

Для того чтобы произошла реакция, частица должна перейти через потенциальный барьер. Если считать движение частицы чисто классическим, то она может это сделать только благодаря термической активации, тогда скорость реакции будет зависеть от температуры по закону Аррениуса, т. е. будет пропорциональна $\exp(-E_a/kT)$. Как мы уже видели ранее, эта зависимость будет нарушена, если учесть возможность туннельного прохождения частицы под барьером. Чем ниже температура, тем меньше вероятность термической активации, тем большую роль будут играть туннельные поправки к скорости реакции.

Естественно, наибольшие туннельные поправки будут для реакций, где переносится самая легкая из «тяжелых» частиц — протон или атом водорода. В качестве примера приведем химическую реакцию между молекулой ацетонитрила CH_3CN и так называемым метильным радикалом CH_3^* . Эта реакция переноса атома водорода явно показывает, что при низких температурах происходит туннелирование атома водорода. Она была изучена американским химиком Ф. Вильямсом как в твердой, так и в газовой фазе при низких температурах вплоть до 70 К. Оказалось, что по мере понижения тем-

* Радикалом называется молекула, в которой одна или несколько валентных связей не насыщены, благодаря чему они легко вступают в химические реакции. Наличие нечашенной связи обозначается точкой (CH_3 получится, если от метана CH_4 — соединения с полностью насыщенными валентными связями — оторвать один атом Н).

пературы зависимость скорости реакции от температуры резко ослабляется, а сама величина скорости оказывается в 10^5 — 10^{15} раз больше той, которая получается, если считать, что скорость зависит от температуры по закону Аррениуса

Может возникнуть вопрос: зачем так уж дотошно изучать туннельный эффект в химических реакциях, если скорости реакций все же гораздо меньше, чем при высоких температурах? Не является ли здесь туннельный эффект лишь некоторой забавной особенностью, тем более что физический смысл туннелирования ясен и понятен? Дело в том, что изучение туннельного эффекта позволяет установить не только высоту потенциального барьера E_a которую можно получить и из высокотемпературных измерений, но и его форму, так как от нее зависит вероятность туннелирования. Для упомянутой выше реакции $U(x)$ в области перехода лучше всего описывается гауссовой кривой

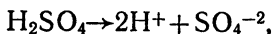
$$U(x) = E_a \exp\left(-\frac{x^2}{b^2}\right),$$

где $E_a = 0,48$ эВ, а $b = 0,64$ Å — полуширина барьера. Таким образом, изучение туннельного эффекта позволяет установить такую важную характеристику, как рельеф потенциальной энергии реагирующей системы

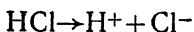
Туннельный эффект в химических реакциях проявляется, кроме того, в сильной изотопической зависимости скорости реакций. Как известно, изотопы одного и того же элемента отличаются только массой ядра атома, но не зарядом. Поэтому их электронная структура одинакова, а значит, и во всех химических соединениях и реакциях термы $U(R_1, \dots, R_n)$ будут одинаковы для разных изотопов. Но поскольку вероятность туннелирования при прочих равных условиях экспоненциально зависит от массы, то скорость химической реакции должна резко уменьшаться с увеличением массы туннелирующей частицы в той мере, в какой эта скорость зависит от туннелирования этой частицы. Поэтому в реакциях переноса атома или иона водорода скорость реакции должна резко уменьшаться при замене легкого изотопа водорода вдвое более тяжелым дейтерием. Такой изотопический эффект в действительности был обнаружен во всех реакциях, где наблюдался туннельный механизм передачи водорода. Так, в только что рассмотренной

реакции скорость передачи дейтерия при 77 К была в 28000 раз меньше скорости передачи водорода

В жидких растворах даже при комнатных температурах изотопический эффект проявляется в кислотно-основных реакциях, где происходит перенос иона водорода, в окислительных реакциях. Особо важное значение он приобретает при электролизе водных растворов кислот, когда на отрицательно заряженном аноде выделяется водород. Как известно, в водных растворах кислоты находятся не в молекулярном, а в диссоциированном на ионы виде. Например, серная кислота H_2SO_4 диссоциирует на ионы

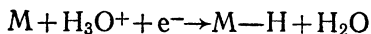


соляная — на ионы



Ионы в растворе окружены молекулами воды, достаточно сильно с ними связанными

Процессы, происходящие на электродах, весьма сложны и, как правило, могут быть разбиты на несколько последовательных стадий, причем скорость всего процесса часто определяет только одна из них — передача атома водорода на электрод. В растворе H^+ соединен с молекулой воды — H_2O . У анода происходит реакция

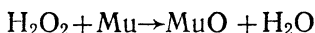


Здесь М условно обозначает поверхностный атом металла на аноде. В этой реакции происходит передача протона на поверхность металла, причем заметим, что потенциальный барьер зависит не только от химической природы металла и раствора, но и от разности потенциалов, приложенной между металлом и раствором, которую можно непрерывно изменять.

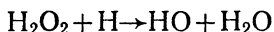
При переходе протона через потенциальный барьер существенную роль играет туннелирование. Следовательно, должен наблюдаться значительный изотопический эффект. Это значит, что скорость перехода дейтерия к аноду будет меньше, чем протонов, — при электролизе раствора он постепенно будет обогащаться тяжелым водородом D. Вода в растворе постепенно будет «тяжелеть». Подбирая подходящую разность потенциалов, можно оптимизировать процесс так, чтобы произведение скорости электролиза на коэффициент разделения изотопов было максимальным.

Несмотря на то что среди ученых имеются серьезные разногласия по поводу механизма различных реакций, входящих в процесс электролиза, одно определенно ясно — экспериментально наблюдаемый изотопический эффект связан с туннелированием ионов водорода. Этот эффект является основой промышленного способа получения тяжелой воды, разработанного еще до войны. Богатая дешевой гидроэлектроэнергией Норвегия тогда начала промышленное производство D_2O , большие запасы которой и сам завод попали в руки немцев после оккупации Норвегии в 1940 г. Известна драматическая история того, как норвежские партизаны и авиация союзников сначала уничтожили запас D_2O , а затем и сам завод, чем серьезно затормозили работы немецких физиков над атомным оружием. Невзирая на кажущуюся простоту принципа, технология разделения изотопов в то время была достаточно сложна, и немцы так и не сумели наладить его производство во время войны. Сейчас тяжелая вода сравнительно недорога и широко употребляется в научных исследованиях и в атомной энергетике.

Изотопический эффект, связанный с туннелированием, проявляется при реакциях с «элементом», еще более легким, чем водород. Таким «элементом» является мюоний (Mu) — атомная система, подобная атому водорода, где вместо ядра — протона находится нестабильная элементарная частица μ^+ мезон. Заряд μ^+ мезона равен заряду протона, а масса примерно в 9 раз меньше. Химические свойства мюония похожи на химические свойства водорода, однако скорости реакций, где существенно туннелирование атома, должны быть значительно больше. Действительно, скорость реакции перекиси водорода с мюонием



в 100 раз больше скорости реакции



μ^+ мезон за время $2,2 \cdot 10^{-6}$ с распадается на позитрон и два нейтрино. Поэтому с помощью мюония можно изучать только быстрые реакции, но зато чувствительность такого мюонного метода изучения химических реакций необычайно велика, так как можно фиксировать буквально единичные акты реакции с по-

мощью соответствующих счетчиков быстрых заряженных частиц — позитронов

Дело в том, что направление вылета позитронов, получившихся в результате распада, связано с направлением спина μ мезона, а это последнее зависит от того, из какого состояния распадается μ мезон. Измерение количества позитронов в направлении их вылета позволяет судить о числе мюонов, вступивших в реакцию.

В 1970 г в Институте химической физики АН СССР Д. П. Кирюхин, А. М. Каплан и В. И. Гольданский впервые наблюдали химическую реакцию, в которой под барьерный туннельный переход совершал не отдельный атом водорода, а целая молекула. Изучалась экзотермическая реакция полимеризации формальдегида CH_2O , когда молекулы, соединяясь, образуют полимерную молекулу, вообще говоря, произвольной длины. Ход реакции изображен на рис. 16. Реакцию ведет радикал —

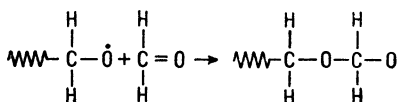


Рис. 16

CH_2O , где свободная валентность, т. е. свободный неспаренный электрон, сосредоточена на атоме кислорода. Когда к концу цепи, у которого расположен этот радикал, подходит молекула формальдегида, происходит электронная перестройка. Одна связь из двойной связи между С и О рвется и переключается на связь О с С. При этом получившийся новый радикал присоединяется к цепи, цепь становится длиннее на одно звено, а на ее конце опять находится радикал, готовый к реакции.

Реакция полимеризации начинается с создания каким-либо образом начальных радикалов (в описываемом случае это достигается облучением γ квантами, которые разбивают молекулы и создают таким образом радикалы, инициирующие реакцию). Прекратиться рост цепи может, если радикал на ее конце погибнет. Это может случиться, например, при встрече двух радикалов $-\text{O}+\text{O}- \rightarrow -\text{O}-\text{O}-$. Измерения скорости полимеризации при достаточно высоких температурах в твердом формальдегиде (T изменялась от 150 до 80 К) дали

энергию активации присоединения одного звена $\sim 0,1$ эВ, а среднее время τ присоединения звена оказалось равным 10^{-5} с при 80 К

Однако при дальнейшем понижении температуры стали все более заметными отклонения от закона Аррениуса, так что при температурах от 10 до 4,2 К τ вообще не зависело от температуры и равнялось 10^{-3} с. Если бы скорость реакции была пропорциональна $\exp(-E_a/kT)$, то τ должно было бы равняться 10^{30} лет при 10 К. Поэтому было сделано предположение, что имеет место туннелирование целой молекулы CH_2O . То, что туннелирует целая молекула, а не какая-то ее легкая часть, подтверждается тем обстоятельством, что скорость полимеризации при дейтерировании формальдегида (когда вместо CH_2O берут CD_2O) практически не изменялась.

В 1974 г группа американских исследователей обнаружила туннельный эффект при реакции связывания молекулы гемоглобина с угарным газом — CO (Эта реакция, после которой молекула гемоглобина теряет способность переносить кислород, — основная причина удушья, отравления угарным газом). При температуре ниже 10 К скорость реакции перестает зависеть от температуры. Такое поведение также может быть объяснено туннелированием молекулы CO .

Итак, экспериментально установлено, что даже при сверхнизких температурах возможно протекание реакции между тяжелыми частицами — явление почти немыслимое до недавнего времени. Это открытие заставляет по-новому проанализировать вопрос о зарождении и распространении жизни во Вселенной, по крайней мере учесть возможность «холодного» образования сложных органических молекул и структур.

Туннелирование тяжелых частиц весьма своеобразно сказывается на спектральных характеристиках молекул, в которых такое туннелирование возможно. Рассмотрим сначала чисто формальный пример. Пусть частица движется в потенциале, представляющем две одинаковые ямы, разделенные барьером (рис 17). Если не учитывать проницаемости барьера, то частица может находиться в одной из ям, правой или левой, причем уровни энергии E_1 , E_2 и т. д. будут одинаковыми в обеих ямах.

Учет возможности туннелирования частицы из одной ямы в другую эквивалентен возникновению взаимодей-

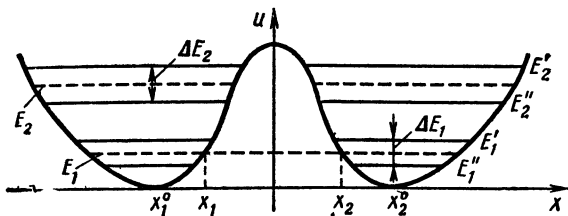


Рис. 17

ствия Благодаря такому туннельному взаимодействию уровень энергии расщепляется, вместо E_1 будут два уровня энергии E_1' и E_1'' . Следовательно, мы уже не можем считать стационарным состояние, когда частица сосредоточена в одной из ям. Частица будет колебаться, переходить из одной ямы в другую и обратно. Частота таких переходов

$$\omega = \omega_0 \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx\right\}.$$

Здесь ω_0 — частота колебаний в одной из ям. Обратим внимание, что показатель туннельной экспоненты здесь вдвое меньше, чем в формуле (8), так как там мы находили вероятность перехода — квадрат модуля волновой функции, а здесь находим изменение самой функции.

Расщепление энергетических уровней ΔE равно $\hbar\omega$. Истинными уровнями энергии являются теперь E_1' и E_1'' , а соответствующие им волновые функции представляют собой симметричную и антисимметричную комбинации из волновых функций каждой ямы. Туннельное расщепление будет тем больше, чем более высокий уровень расщепляется. Так $\Delta E_2 > \Delta E_1$. Если в ямах движется заряженная частица, то при ее переходах с одного туннельного уровня на другой будет испускаться или поглощаться квант электромагнитной энергии.

Прекрасным примером, иллюстрирующим наше схематическое рассмотрение, является молекула аммиака — NH_3 . Она представляет собой по форме плоскую треугольную пирамиду (рис 18). Два положения пирамиды — основанием вниз и основанием вверх совершенно одинаковы по своим характеристикам, они соответствуют двум минимумам потенциальной энергии x_1^0

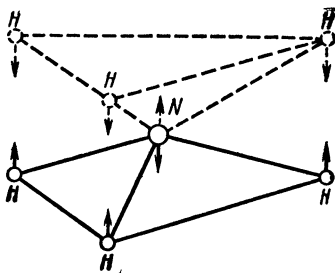


Рис 18

и x_2^0 на рис 17 Колебания системы вблизи каждого из минимумов с энергетическими уровнями E_1 , E_2 и т д изображены на рис 18 стрелками, условно обозначающими движение атомов Между двумя минимумами — двумя положениями пирамиды — есть потенциальный барьер, через который могут туннелировать (конечно, согласованно) три атома водорода

Туннельное расщепление колебательных уровней молекулы аммиака было открыто в 1934 г Так как в молекуле NH_3 электроны с атомов водорода оттянуты к азоту,* то значит, туннелируют заряженные частицы Поэтому при переходах между уровнями в туннельных парах происходит поглощение или излучение электромагнитных квантов Энергии расщепления составляют тысячные доли электронвольта, т е длины волн лежат в сантиметровом диапазоне Структура молекулы аммиака хорошо известна, все туннельные расщепления можно легко рассчитать Расчетные и измеренные величины прекрасно совпадают При замене атомов водорода дейтерием туннельное расщепление уменьшается в точном соответствии с теорией

Подчеркнем, что туннельные эффекты в спектроскопии молекул являются довольно часто хорошим экспериментальным критерием расчетов термов сложных молекул На молекулах аммиака, а именно используя ее туннельные пары уровней, Н Г Басов, А М Прохоров и Ч Таунс построили первый квантовый усилитель — мазер С этого открытия началось бурное развитие и мазерной и лазерной техники, в значительной мере революционизировавшей многие отрасли науки и производства,

ВМЕСТО ЗАКЛЮЧЕНИЯ

Многоликость туннельного эффекта, с которым познакомился читатель, демонстрирует одно из важнейших свойств окружающего нас мира — его единство, глубокую связь между очень далекими на первый взгляд явлениями.

В настоящее время исследования туннелирования активно продолжают в физике твердого тела, биологии, в низкотемпературных химических реакциях. На этом пути возможны новые интересные открытия.

Если после прочтения этой брошюры читатель захочет поглубже познакомиться с туннельными процессами, если он оценил их универсальность, то автор сочтет свою задачу выполненной.

ЛИТЕРАТУРА

Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М. Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.

Туннельные явления в твердых телах. Под ред. Э. Бурштейн, С. Лундквист. М., Мир, 1973.

Белл Р. П. Протон в химии. М., Мир, 1977.

Кулик И. О., Янсон И. К. Эффект Джозефсона. М., Наука, 1970.

Каганов М. И. Электроны, фононы, магноны. М., Наука, 1979.

Физики о физике. Сверхпроводимость, М., Знание, 1975.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
Работа и потенциальная энергия	4
Некоторые сведения из квантовой механики частицы	7
Туннельное прохождение	10
α распад	17
Термоядерные реакции	22
Туннелирование электронов в твердых телах	27
Туннельная спектроскопия	31
Туннелирование в полупроводниках	37
Туннелирование между примесями	43
Туннельные явления в сверхпроводниках	49
Туннельный эффект в химии	53
Вместо заключения	63
Литература	63

Мортко Аврумович Кожушнер

ТУННЕЛЬНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

Гл. отраслевой редактор **Л. А. Ерлыкин**, Редактор **К. А. Кутузова**.
Мл. редактор **Н. А. Сергеева**, Обложка художника **М. А. Дорохова**. Худож. редактор **М. А. Гусева**, Техн. редактор **Л. А. Солнцева**. Корректор **В. Е. Калинина**,

ИБ № 5445

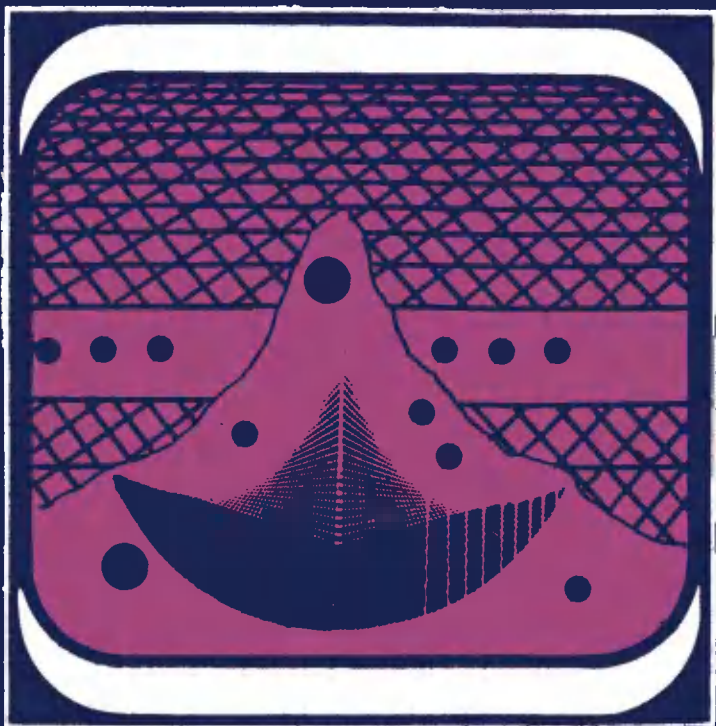
Сдано в набор 3.12.82. Подписано к печати 17.02.83. Т-02120. Формат бумаги 84×108¹/₃₂. Бумага тип. № 3, Гарнитура литературная. Печать высокая. Усл. печ. л. 3,86. Усл. кр.-отт. 3,57. Уч.-изд. л. 3,3. Тираж 33 080 экз. Заказ 2226. Цена 11 коп. Издательство «Знание». 101835, ГСП, Москва, Центр, проезд Серова, д. 4. Индекс заказа 834003.
Типография Всесоюзного общества «Знание». Москва, Центр, Новая пл., д. 3/4,

ДОРОГОЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Брошюры этой серии в розничную продажу не поступают, поэтому своевременно оформляйте подписку. Подписка на брошюры издательства „Знание“ ежеквартальная, принимается в любом отделении „Союзпечати“.

Напоминаем Вам, что сведения о подписке Вы можете найти в „Каталоге советских газет и журналов“ в разделе „Центральные журналы“, рубрика „Брошюры издательства „Знание“.

Цена подписки на год 1 р. 32 к.



СЕРИЯ
ФИЗИКА