

**Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Амурский государственный университет»**

Кафедра Физики

**УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА**

Основной образовательной программы по специальности 010701.65 - Физика

Благовещенск 2012

УМКД разработан канд. физ.-мат. наук, доцентом Верхотуровой Ириной Владимировной

Рассмотрен и рекомендован на заседании кафедры

Протокол заседания кафедры от «21» 09 2012 г. № 1

Зав.кафедрой  И.А. Голубева

УТВЕРЖДЕН

Протокол заседания УМСС 010701.65 - Физика

от «10» 09 2012 г. № 1

Председатель УМСС  Е.А. Ванина

СОДЕРЖАНИЕ

1. Рабочая программа учебной дисциплины	4
2. Краткое изложение программного материала	3
3 Методические указания (рекомендации)	75
3.1 Методические указания для преподавателя	75
3.2 Методические указания для студентов	77
3.3 Методические указания по самостоятельной работе студента	78
4. Контроль знаний	81
4.1 Текущий контроль	81
4.2 Итоговый контроль знаний	81
5. Интерактивные технологии и инновационные методы, используемые в образовательном процессе.	83

1. Рабочая программа учебной дисциплины.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Физика конденсированного состояния вещества» является получение базовых знаний в области физики конденсированного состояния вещества, что позволит им свободно ориентироваться в обширнейшей информации данной области физики и поможет в дальнейшей самостоятельной работе по избранной специальности.

Задачи дисциплины:

1. Изучение основных принципов построения и свойств конденсированных сред;
2. Овладение фундаментальными понятиями, законами и теориями физики конденсированных сред, а также методов их исследования;
3. Умения исследовать и прогнозировать свойства конденсированных сред при выполнении научно-исследовательской работы.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВПО:

Дисциплина ДС.Ф. 03 «Физика конденсированного состояния вещества» относится к дисциплинам федерального компонента цикла «Дисциплины специализации». Другие дисциплины, такие как «НИРС», «Физика полупроводников и диэлектриков» изучаются на основе знаний данной дисциплины.

Для освоения дисциплины необходимо знать:

- 1) курс Общей физики;
- 2) элементы дисциплины «Математика»;
- 3) Квантовую физику;
- 4) Физику атома и атомных явлений.

Содержательная часть дисциплины по ГОС ВПО:

Азбука кристаллографии (основные идеи, исходные положения и определения), строение конденсированных сред, кристаллическая структура и ее описание, симметрия кристалла, точечные и пространственные (федоровские) группы, дифракция в кристаллах. Межатомные силы и энергия связи, электронные волны в кристалле, энергия Ферми, квазичастицы и электронная теплоемкость. Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок, функция радиального распределения частиц, пространственная когерентность, принципы плотной и валентной упаковок. Упругие свойства кристаллов, тензоры напряжений и деформаций, устойчивость кристаллических решеток. Динамика кристаллической решетки, упругие волны, смещения атомов и фононы, теплоемкость, ангармонизм. Электронные свойства – магнитные, электрические, оптические гальваномагнитные, сверхпроводящие.

По завершению изучения дисциплины студент должен:

- **Знать** теоретические и экспериментальные проблемы физики конденсированного состояния вещества и возможные пути их решения;
- **Уметь** решать задачи с использованием приобретенных теоретических знаний.
- **Владеть** теоретическими знаниями и математическим аппаратом для решения простейших задач физики конденсированного состояния вещества.

3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

«Физика конденсированного состояния вещества»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 81 час.

№ п/п	Модуль дисциплины	Виды учебной работы				Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
		Лекции (час.)	Практические занятия (час.)	Лабораторные раб. (час.)	СРС (час.)	
1	Модуль 1 «Принципы построения конденсированных сред. Силы межмолекулярного взаимодействия в конденсированных средах»	4	4		4	Контроль посещений аудиторных занятий. Контроль выполнения заданий на практических занятиях. Контроль подготовки конспектов тем на самостоятельное изучение. Контроль выполнения домашних заданий.
2	Модуль 2 «Дефекты конденсированных сред»	4	2		2	Контроль посещений аудиторных занятий. Контроль выполнения заданий на практических занятиях. Контроль подготовки конспектов тем на самостоятельное изучение. Контроль выполнения домашних
3	Модуль 3 «Упругие свойства кристаллов»	4	2		2	Контроль посещений аудиторных занятий. Контроль выполнения заданий на практических занятиях. Контроль подготовки конспектов тем на самостоятельное

						изучение. Контроль выполнения домашних
4	Модуль 4 «Динамика кристаллической решетки»	8	4		2	Контроль посещений аудиторных занятий. Контроль выполнения заданий на практических занятиях. Контроль подготовки конспектов тем на самостоятельное изучение. Контроль выполнения домашних
5	Модуль 5 «Электронные свойства конденсированных сред».	16	6		7	Контроль посещений аудиторных занятий. Контроль выполнения заданий на практических занятиях. Контроль подготовки конспектов тем на самостоятельное изучение. Контроль выполнения домашних Контрольная работа.
6	Подготовка к экзамену				10	Экзамен
7	Итого	36	18		27	

4. СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ И ТЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 ЛЕКЦИИ

Модуль 1 «Принципы построения конденсированных сред. Силы межмолекулярного взаимодействия в конденсированных средах»

1.1 Азбука кристаллографии (основные идеи, исходные положения и определения).

1.2 Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок, функция радиального распределения частиц, пространственная когерентность, принципы плотной и валентной упаковок.

1.3 Кристаллическая структура и ее описание, симметрия кристалла, точечные и пространственные (федоровские) группы. Анизотропия твердых тел. Монополикристаллические твердые тела.

1.4 Дифракция в кристаллах.

1.5 Межатомное взаимодействие. Основные типы связей в твердых телах. Классификация твердых тел. Энергия связи. Молекулярные, ионные, ковалентные, металлические кристаллы. Электронные волны в кристалле, энергия Ферми, квазичастицы и электронная теплоемкость.

Модуль 2 «Дефекты конденсированных сред»

2.1. Точечные дефекты. Энергия образования и диффузия точечных дефектов. Равновесная концентрация точечных дефектов. Причины возникновения.

2.2 Линейные дефекты. Дислокации. Контур и вектор Бюргерса. Напряжения, необходимые для образования дислокаций в совершенном кристалле. Движение дислокаций. Напряжения, связанные с дислокациями. Энергия дислокаций. Взаимодействие дислокаций между собой и с точечными дефектами. Источники дислокаций.

2.3 Двумерные дефекты.

2.4 Трехмерные дефекты.

2.5 Процессы упорядочения в твердых телах.

Модуль 3 «Упругие свойства кристаллов»

3.1 Напряженное и деформированное состояние твердых тел.

3.2 Упругость Закон Гука для изотропных и анизотропных твердых тел. Тензоры напряжений и деформаций, обобщенный закон Гука

3.3 Пластические свойства кристаллических твердых тел. Хрупкое разрушение.

Модуль 4 «Динамика кристаллической решетки»

4.1 Одномерные колебания однородной струны.

4.2 Упругие волны в монокристаллах.

4.3 Колебания одноатомной линейной цепочки.

4.4 Колебания одномерной решетки с базисом.

4.5 Колебания атомов трехмерной решетки.

4.6 Теплоемкость твердых тел. Закон Дюлонга-Пти. Теория теплоемкости Эйнштейна. Теория теплоемкости Дебая. Фононы. Теплоемкость твердых тел. Теплоемкость металлов. Распределение Ферми-Дирака. Вклад свободных электронов в теплоемкость твердых тел.

4.7 Тепловое расширение твердых тел. Ангармонизм.

4.8 Теплопроводность твердых тел. Теплопроводность, обусловленная атомными колебаниями. Теплопроводность металлов. Распределение Ферми-Дирака. Вклад свободных электронов в теплопроводность твердых тел.

4.9 Диффузия в твердых телах.

Модуль 5 «Электронные свойства конденсированных сред»

5.1 Электрические свойства конденсированных сред.

Классификация твердых тел по величине электропроводности. Уравнение Шредингера для твердого тела. Одноэлектронное приближение. Функция Блоха. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зоны Брюллиэна. Поверхность Ферми. Модель свободных электронов. Приближение сильной связи. Приближение слабой связи (Модель Кронига-Пенни). Энергетический спектр электронов в кристалле. Движение Электронов в периодическом поле кристалла под действием внешнего поля. Эффективная масса электрона. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники. Энергетические уровни примесных атомов в кристалле. Электропроводность металлов. Классическая теория проводимости металлов. Квантовая теория проводимости металлов. Проводимость собственных и примесных полупроводников. Природа носителей тока в полупроводниках и их подвижность. Уровень Ферми в собственных и примесных полупроводниках. Электропроводность диэлектриков. Свойства диэлектриков. Поляризация диэлектриков. Основные характеристики. Электронная упругая поляризация. Ионная упругая поляризация. Дипольная упругая поляризация. Свойства диэлектриков. Особенности тепловой поляризации. Ионная тепловая поляризация. Электронная тепловая поляризация. Дипольная тепловая поляризация. Свойства диэлектриков. Связь между диэлектрической

проницаемостью и поляризуемостью. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости. Диэлектрические потери. Сегнетоэлектрики.

5.2 Магнитные свойства конденсированных сред.

Магнитное поле в магнетиках. Магнитные свойства атомов. Классификация магнетиков. Природа диамагнетизма. Природа парамагнетизма. Диамагнетизм и парамагнетизм твердых тел. Ферромагнетизм. Кривая намагничивания. Эффект Баркгаузена. Магнитный гистерезис. Молекулярное поле Вейсса. Влияние температуры на магнитные свойства ферромагнетиков. Опыт Дорфмана. Обменное взаимодействие и его роль в возникновении ферромагнетизма. Спиновые волны. Антиферромагнетизм и ферримагнетизм. Ферромагнитные домены.

5.3 Оптические свойства конденсированных систем.

Виды взаимодействия света с твердым телом. Оптические константы. Поглощение света кристаллами. Рекомбинационное излучение в полупроводниках. Спонтанное и индуцированное излучение. Лазеры.

5.4 Гальваномагнитные свойства конденсированных сред.

Свойства твердых тел в сильных электрических полях. Эффект Холла.

5.5. Сверхпроводящие свойства конденсированных сред.

Сверхпроводящее состояние. Нулевое сопротивление. Температура сверхпроводящего перехода. Идеальный диамагнетизм. Критическое магнитное поле. Кристаллическая структура и изотопический эффект. Электронный вклад в теплоемкость сверхпроводника. Поглощение электромагнитного излучения. Квантование магнитного потока. Эффекты Джозефсона. Высокотемпературная сверхпроводимость. Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов. Теория Гинзбурга-Ландау. Притяжение между электронами. Куперовские пары. Теория Бардина-Купера-Шриффера.

4.2 ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

Задания к практическим занятиям формируются на основе задачника [3] и выдаются преподавателем в начале семестра по следующим темам:

№ п/п	№ раздела (темы) дисциплины	Тематика практического занятия	Трудоемкость в часах
1	Модуль 1	Химические связи. Энергия связи кристалла.	4
2	Модуль 2	Дефекты в кристаллах.	2
3	Модуль 3	Механические свойства твердых тел.	2
4	Модуль 4	Колебания атомов кристаллической решетки. Теплоемкость твердых тел.	4
5	Модуль 5	Электронный газ в металлах. Проводимость собственных и примесных полупроводников. Диэлектрики. Диамагнетизм и парамагнетизм.	6

5. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ

№ п/п	№ раздела (темы) дисциплины	Форма (вид) самостоятельной работы	Трудоемкость в часах
1	Модуль 1	Подготовка конспектов тем на самостоятельное изучение. Выполнение домашнего задания	4
2	Модуль 2	Подготовка конспектов тем на самостоятельное изучение. Выполнение домашнего задания	2
3	Модуль 3	Подготовка конспектов тем на самостоятельное изучение. Выполнение домашнего задания	2
4	Модуль 4	Подготовка конспектов тем на самостоятельное изучение.	2

		Выполнение домашнего задания	
5	Модуль 5	Подготовка конспектов тем на самостоятельное изучение. Выполнение домашнего задания Подготовка к контрольной работе.	7
6	Подготовка к экзамену		10

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В учебном процессе используются лекции, практические занятия, индивидуальные занятия, контрольные работы. Для достижения поставленной цели применяются объяснительно-иллюстративные, проблемные, поисковые, активные и интерактивные технологии.

При чтении лекций по данной дисциплине используется такой неимитационный метод активного обучения, как «Проблемная лекция». При проведении практических занятий используется либо «Мозговой штурм», либо «Метод Дельфи», которые направлены на вовлечение всех студентов в решении конкретных задач.

7. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

7.1 Контрольная работа

Контрольная работа выполняется в конце семестра по всем пройденным модулям семестра. В контрольной работе содержится четыре задачи. Контрольная работа направлена на проверку умений студентов применять полученные теоретические знания в отношении определенной конкретной задачи.

7.3 Подготовка конспектов по темам на самостоятельное изучение

Модуль 1: Азбука кристаллографии (основные идеи, исходные положения и определения). Кристаллическая структура и ее описание, симметрия кристалла, точечные и пространственные (федоровские) группы.

Модуль 2: Причины возникновения. Взаимодействие дислокаций между собой и с точечными дефектами. Источники дислокаций.

Модуль 3 : Хрупкое разрушение.

Модуль 4 : Диффузия в твердых телах.

Модуль 5 : Свойства твердых тел в сильных электрических полях. Эффект Холла. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости. Диэлектрические потери. Сегнетоэлектрики. Кривая намагничивания. Эффект Баркгаузена. Магнитный гистерезис. Ферромагнитные домены. Кристаллическая структура и изотопический эффект. Электронный вклад в теплоемкость сверхпроводника. Поглощение электромагнитного излучения. Спонтанное и индуцированное излучение. Лазеры.

7.4 Примерные экзаменационные вопросы

1. Предмет физики конденсированного состояния. Основные понятия. Краткие исторические сведения.

2. Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок. Структура кристаллов. Анизотропия твердых тел. Моно- поликристаллические твердые тела.

3. Межатомное взаимодействие. Классификация твердых тел по типам связи. Энергия связи. Молекулярные, ионные, ковалентные, металлические кристаллы.

4. Дефекты в твердых телах. Классификация дефектов по геометрическому признаку. Точечные дефекты. Энергия образования и диффузия точечных дефектов. Равновесная концентрация точечных дефектов. Причины возникновения.
5. Дефекты в твердых телах. Классификация дефектов по геометрическому признаку. Линейные дефекты. Дислокации. Контур и вектор Бюргерса. Напряжения, необходимые для образования дислокаций в совершенном кристалле. Движение дислокаций. Напряжения, связанные с дислокациями. Энергия дислокаций. Взаимодействие дислокаций между собой и с точечными дефектами. Источники дислокаций.
6. Дефекты в твердых телах. Классификация дефектов по геометрическому признаку. Двумерные дефекты. Трехмерные дефекты. Процессы упорядочения в твердых телах.
7. Механические свойства твердых тел. Напряженное и деформированное состояние твердых тел. Упругость. Закон Гука для изотропных и анизотропных твердых тел. Тензоры напряжений и деформаций, обобщенный закон Гука. Пластические свойства кристаллических твердых тел. Хрупкое разрушение.
8. Колебания атомов кристаллической решетки. Одномерные колебания однородной струны. Упругие волны в монокристаллах.
9. Колебания атомов кристаллической решетки. Колебания одноатомной линейной цепочки. Колебания одномерной решетки с базисом. Колебания атомов трехмерной решетки.
10. Тепловые свойства твердых тел. Теплоемкость твердых тел. Закон Дюлонга-Пти. Теория теплоемкости Эйнштейна. Теория теплоемкости Дебая.
11. Тепловые свойства твердых тел. Теплоемкость металлов. Распределение Ферми-Дирака. Вклад свободных электронов в теплоемкость твердых тел..
12. Тепловые свойства твердых тел. Тепловое расширение твердых тел.
13. Тепловые свойства твердых тел. Теплопроводность твердых тел. Теплопроводность, обусловленная атомными колебаниями.
14. Тепловые свойства твердых тел. Теплопроводность металлов. Распределение Ферми-Дирака. Вклад свободных электронов в теплопроводность твердых тел.
15. Диффузия в твердых телах.
16. Основы зонной теории. Классификация твердых тел по величине электропроводности. Уравнение Шредингера для твердого тела. Одноэлектронное приближение. Функция Блоха. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зоны Брюллиэна. Поверхность Ферми.
17. Основы зонной теории. Модель свободных электронов. Приближение сильной связи. Приближение слабой связи (Модель Кронига-Пенни). Энергетический спектр электронов в кристалле.
18. Основы зонной теории. Движение Электронов в периодическом поле кристалла под действием внешнего поля. Эффективная масса электрона.
19. Основы зонной теории. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники. Энергетические уровни примесных атомов в кристалле.
20. Электрические свойства твердых тел. Электропроводность металлов. Классическая теория проводимости металлов. Квантовая теория проводимости металлов.
21. Электрические свойства твердых тел. Проводимость собственных и примесных полупроводников. Природа носителей тока в полупроводниках и их подвижность. Уровень Ферми в собственных и примесных полупроводниках.
22. Электрические свойства твердых тел. Электропроводность диэлектриков. Свойства твердых тел в сильных электрических полях. Эффект Холла.
23. Свойства диэлектриков. Поляризация диэлектриков. Основные характеристики. Электронная упругая поляризация. Ионная упругая поляризация. Дипольная упругая поляризация.
24. Свойства диэлектриков. Особенности тепловой поляризации. Ионная тепловая

поляризация. Электронная тепловая поляризация. Дипольная тепловая поляризация.

25. Свойства диэлектриков. Связь между диэлектрической проницаемостью и поляризуемостью. Частотная зависимость диэлектрической проницаемости. Диэлектрические потери. Сегнетоэлектрики.

26. Магнитные свойства твердых тел, магнитные свойства атомов. Классификация магнетиков. Магнитное поле в магнетиках. Природа диамагнетизма. Природа парамагнетизма. Диамагнетизм и парамагнетизм твердых тел.

27. Магнитные свойства твердых тел. Ферромагнетизм. Кривая намагничивания. Эффект Баркгаузена. Магнитный гистерезис. Молекулярное поле Вейсса. Влияние температуры на магнитные свойства ферромагнетиков. Опыт Дорфмана. Обменное взаимодействие и его роль в возникновении ферромагнетизма. Спиновые волны.

28. Магнитные свойства твердых тел. Антиферромагнетизм и ферримагнетизм. Ферромагнитные домены.

29. Сверхпроводимость. Нулевое сопротивление. Температура сверхпроводящего перехода. Идеальный диамагнетизм. Критическое магнитное поле. Кристаллическая структура и изотопический эффект.

30. Сверхпроводимость. Электронный вклад в теплоемкость сверхпроводника. Поглощение электромагнитного излучения. Квантование магнитного потока. Эффекты Джозефсона.

31. Сверхпроводимость. Высокотемпературная сверхпроводимость.

32. Сверхпроводимость. Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов.

33. Сверхпроводимость. Теория Гинзбурга-Ландау. Притяжение между электронами. Куперовские пары. Теория Бардина-Купера-Шриффера.

34. Оптические свойства твердых тел. Виды взаимодействия света с твердым телом. Оптические константы. Поглощение света кристаллами. Рекомбинационное излучение в полупроводниках.

7.5 Критерии оценки при сдаче экзамена

1. К сдаче экзамена допускаются студенты:

- посетившие все лекционные, практические занятия данного курса;

При наличии пропусков темы пропущенных занятий должны быть отработаны.

Программные вопросы к экзамену доводятся до сведения студентов за месяц до экзамена.

2. Критерии оценки:

Итоговая оценка знаний студентов должна устанавливать активность и текущую успеваемость студентов в течение семестра по данному предмету.

Оценка «отлично» - ставится при 90 - 100 % правильных ответов на экзамене, и при решенной задаче.

Оценка «хорошо» - ставится при 70 - 90 % правильных ответов на экзамене, и при решенной задаче.

Оценка «удовлетворительно» - ставится 50 - 70 % правильных ответов на экзамене, и при решенной задаче.

Оценка «неудовлетворительно» - ставится до 50 % правильных ответов на экзамене, и при нерешенной задаче.

8.УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Физика конденсированного состояния вещества»

а) **основная литература:**

1. Епифанов, Г.И. Физика твёрдого тела: учеб. пособие/ Г.И. Епифанов. -3-е изд., испр. – СПб.: Лань, 2010. – 288 с.

2. Гуртов, В.А. Физика твердого тела для инженеров: учеб. пособие: рек. УМО/ В.А. Гуртов, Р.Н. Осауленко; ред. Л.А. Алешина.- М.: Техносфера, 2007.- 520 с.
3. Матухин, В.Л. Физика твёрдого тела: учеб. пособие/ В.Л. Матухин, В.Л. Ермаков. – СПб.: Лань, 2010. – 219 с.

б) дополнительная литература:

1. Миронова, Г.А. Конденсированное состояние вещества: от структурных единиц до живой материи: [в 2 т.]: учеб. пособие: рек. УМО/ Г.А. Миронова Т.1.-2004.-532 с, Т.2.-2006.-840 с.
2. Физика конденсированного состояния вещества: учеб.-метод. комплекс для спец. 010701 «Физика»/ сост. И.В. Верхотурова.- Благовещенск: Изд-во Амур. гос. ун-та, 2007.-166 с.
3. Иродов, И.Е. Задачи по общей физике: учеб пособие: рек НМС Мин. обр. РФ/ И.Е. Иродов.-8-е изд., стер.- СПб.: Лань, 2004.- 416 с.
4. Гольдаде, В.А. Физика конденсированного состояния/ В.А. Гольдаде, Л.С. Пинчукред; под ред. Н.К. Мышкина.- Мн.: Беларуская навука, 2009.-658 с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

№	Наименование ресурса	Краткая характеристика
1	http://www.iqlib.ru	Интернет-библиотека образовательных изданий, в который собраны электронные учебники, справочные и учебные пособия.
2	http://rucont.ru/	Электронная библиотечная система, в который собраны электронные учебники, справочные и учебные пособия.

г) периодические издания:

1. Известия вузов. Физика.
2. Известия РАН. Серия физическая.
3. Доклады Академии наук.
4. Журнал экспериментальной и теоретической физики.
5. Успехи физических наук.
6. Оптика и спектроскопия.
7. Оптический журнал.
8. Реферативный журнал «Физика».

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «Физика конденсированного состояния вещества»

№ п/п	Наименование лабораторий, ауд.	Основное оборудование
1.	112	Комплект ТСО Мультимедийный проектор Ноутбук

2. Краткое изложение программного материала

ЛЕКЦИОННЫЙ МАТЕРИАЛ

Модуль 1 «Принципы построения конденсированных сред. Силы межмолекулярного взаимодействия в конденсированных средах»

1.1 Азбука кристаллографии (основные идеи, исходные положения и определения).

Главной отличительной особенностью кристаллических твердых тел является периодическое расположение в пространстве их атомов, образующих пространственную трехмерную кристаллическую решетку.

Кристалл можно представить как периодически повторяющиеся в пространстве одинаковые элементарные структурные единицы - *элементарные ячейки кристалла*, состоящие из одного, в простейшем случае, или нескольких атомов каждая.

Элементарная ячейка в общем случае имеет форму косоугольного параллелепипеда. Все расположенные в ней атомы принято называть *базисом элементарной ячейки* кристалла. Закономерности строения элементарной ячейки и базиса, в частности степень их симметричности определяет многие свойства кристалла, в первую очередь электрические, магнитные и механические. Элементарная ячейка может содержать как один, так и несколько атомов.

1.2 Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок, функция радиального распределения частиц, пространственная когерентность, принципы плотной и валентной упаковок.

Понятие порядок в физике твердого тела означает коррелированность (согласованность) в расположении атомов. Дальним порядком называют корреляцию в расположении атомов на расстояниях, значительно превышающих межатомные, а теоретически – при неограниченном увеличении расстояния. Примером полностью упорядоченной макроскопической системы является кристалл, в котором расположение атомов полностью детерминировано вследствие трансляционной симметрии. Наличие структурной корреляции только на малых расстояниях, сравнимых со средним расстоянием между ближайшими атомами, называется ближним порядком.

Положим друг на друга два слоя плотно соприкасающихся шаров, обозначив нижний слой буквой А, верхний - В. Третий слой можно положить на слой В поразному. В одном случае - точно так же, как слой А, в другом - шары третьего слоя займут неповторяемую позицию С, их затем можно перекрыть четвертым слоем шаров, который повторит положение слоя А. Упаковка первого типа характеризуется повторяемостью. Её называют двуслойной (а по характеру симметрии - гексагональной). Для упаковок второго типа характерна повторяемость. Ее называют трехслойной (кубической). Имеется много других порядков повторяемости слоев в плотнейшей укладке шаров, но все они будут являться комбинациями первых двух упаковок. Плотны уложенные шары занимают лишь 74% заполняемого ими объема, а 26% приходится на пустоты между шарами. Их два типа. Одни пустоты, меньшие по размеру, располагаются между четырьмя шарами. Их называют тетраэдрическими. Другие, большие по размеру пустоты ограничены шестью шарами - октаэдрические.

Если считать кристаллические вещества построенными по принципу идеальной плотнейшей упаковки, все многообразие структур минералов должно определяться тремя факторами:

- 1) типом плотнейшей упаковки, размером и валентностью атомов, образующих эту упаковку;
- 2) набором атомов, заполняющих плотнейшей упаковки;
- 3) узором заселения пустот. Многообразие сочетаний этих факторов очевидно. Однако число

минералов с идеальной плотнейшей упаковкой атомов относительно невелико. Это объясняется в первую очередь тем, что такие кристаллические постройки возможны для минералов с направленными химическими связями - металлической или ионной. Действительно, к примеру, самородные металлы имеют структуры с трехслойной (кубической) плотнейшей упаковкой, самородные иридий и цинк - с двухслойной (гексагональной) упаковкой.

1.3 Кристаллическая структура и ее описание, симметрия кристалла, точечные и пространственные (федоровские) группы. Анизотропия твердых тел. Моно-поликристаллические твердые тела.

Выбор элементарной ячейки. Описание структуры любого кристалла можно и принято проводить, охарактеризовав его элементарную ячейку. Ясно, что выбрать элементарную ячейку одного и того же кристалла можно несколькими способами (рис. 1.1). При таком выборе стремятся к наиболее простой форме ячейки, в частности к наибольшему числу прямых углов, а также к минимальности ее объема. Ячейку с наименьшим объемом принято называть *примитивной элементарной ячейкой*.

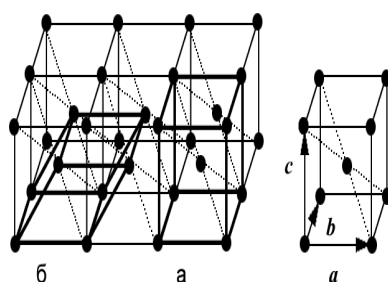


Рис. 1.1. Выбор элементарной ячейки ОЦК решетки.

Выбранную элементарную ячейку характеризуют тремя *векторами основных трансляций* $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ совпадающими с ее тремя ребрами, сходящимися в одной точке. Две точки с радиус-векторами \vec{r} и \vec{r}' , связанные соотношением $\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$, где n_1, n_2, n_3 - целые числа, описывают одну и ту же точку базиса, но в разных элементарных ячейках кристалла. В таком случае удобно подробно охарактеризовать расположение атомов базиса в пределах одной элементарной ячейки, а всю структуру кристалла получить трансляцией - "тиражированием" данной ячейки, осуществляя параллельные переносы на векторы $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$, называемые *векторами трансляций*.

Кристаллические решетки большинства веществ имеют как правило несколько *элементов симметрии*. Существует несколько элементов симметрии. С элементом симметрии связана операция симметрии, при выполнении которой пространственная решетка переходит сама в себя. Элементом симметрии часто бывает поворотная ось на углы $2\pi/2; 2\pi/3; 2\pi/4; 2\pi/6$, называемая соответственно *осью вращения* (или *поворотной осью*) 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядка. Приведенные на рис. 1.1 (а) и 1.2 решетки имеет много осей вращения, например оси четвертого порядка, оси третьего порядка, второго порядка. Другими элементами симметрии являются *плоскость симметрии* (часто ее называют *зеркальной плоскостью*) и *центр симметрии* (часто его называют *центром инверсии*).

Типы кристаллических решеток. С помощью теории групп было показано, что все многообразие кристаллов может быть описано с помощью 14 типов кристаллических решеток (*решеток Браве*), изображенных на рис. 1.3. Их принято группировать в семь систем, различающихся видом элементарной ячейки: триклинную, моноклинную, ромбическую, тетрагональную, тригональную, гексагональную и кубическую.

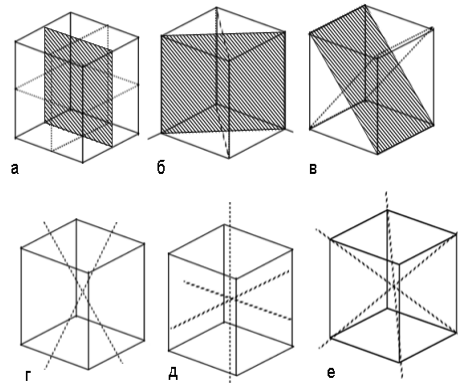


Рис. 1.2. Некоторые элементы симметрии куба: а) 3 плоскости симметрии, перпендикулярные ребрам куба; б, в) 4 из 6 плоскостей симметрии, перпендикулярные диагонали граней куба г) 2 из 6 осей симметрии 2-го порядка, параллельные диагоналям граней куба, проходящие через середины противоположных ребер; д) 3 оси симметрии 4-го порядка, перпендикулярные граням куба и проходящие через их центры; е) 4 оси симметрии 3-го порядка, параллельные диагоналям куба, проходящие через его вершины.

Некоторые из этих решеток имеют разновидности: примитивная - P , объемноцентрированная (ОЦ) - I , гранецентрированная (ГЦ) - F и с одной парой центрированных противоположных граней - C .

1. В *триклинной системе* как все углы не равны друг другу так и все длины сторон не равны друг другу. Данная решетка имеет центр симметрии в центре элементарной ячейки.
2. В *моноклинной системе* ячейка имеет форму прямой призмы с ребрами разной длины. Ячейка может быть с центрированными основаниями прямой призмы C и примитивной P . У такой решетки добавляются элементы симметрии: плоскость симметрии, параллельная основанию прямой призмы, и ось вращения 2-го порядка, проходящая через середины оснований.
3. В *ромбической системе* ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда с ребрами разной длины. Ячейка имеет все 4 разновидности: P, I, F, C . У такой решетки еще больше элементов симметрии: три плоскости симметрии, параллельные граням, и три оси вращения 2-го порядка, проходящие через середины противоположных одинаковых граней.
4. В *тетрагональной системе* ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда с квадратным основанием. Ячейка может быть примитивной P и ОЦ I . По сравнению с предыдущей решеткой у нее появляется ось вращения 4-го порядка и несколько плоскостей симметрии.

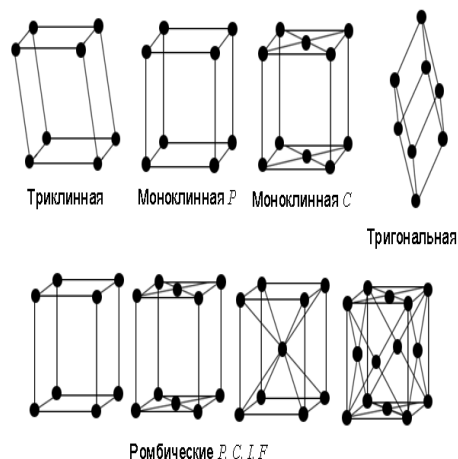


Рис. 1.3а. Решетки Браве.

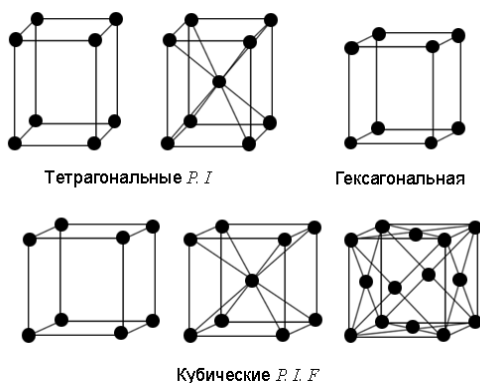


Рис. 1.3б. Решетки Браве.

5. В кубической системе ячейка имеет форму куба. Ячейка может быть с центрированными гранями куба (*ГЦК* - *гранецентрированный куб*) или центром (*ОЦК* - *объемноцентрированный куб*). Это самая симметричная решетка, элементы симметрии которой мы рассматривали выше (см. рис. 1.2).

6. В гексагональной системе ячейка имеет форму прямой призмы с ромбом в основании, причем угол в ромбе равен 60 градусам. Часто рассматривают утроенную ячейку (см. рис. 1.4), имеющую вид правильной шестигранной призмы с осью симметрии шестого порядка (отсюда и ее название).

7. В тригональной системе ячейку принято выбирать в виде ромбоэдра, все грани которого - одинаковые ромбы с углом при вершине $\neq 90^\circ$. Заметим, что в случае ОЦК и ГЦК решеток можно выбрать элементарную тригональную ячейку с объемом в 2 и 4 раза меньшим, чем выбранная кубическая.

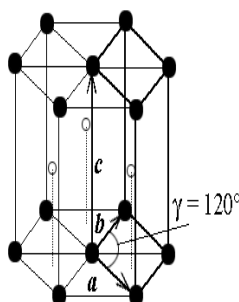


Рис. 1.4 Элементарные ячейки гексагональной решетки.

Симметрия решетки определяет анизотропию (различные значения по различным направлениям) физических свойств. Анизотропия некоторых физических свойств может быть предсказана по виду элементарной ячейки.

Ячейка Вигнера-Зейца. Существует способ выбора элементарной ячейки, называемой *ячейкой Вигнера-Зейца*, используемой в последующих главах для анализа движения частиц в кристалле. Для выбора ячейки выделяют область пространства "более приближенную" к данному узлу кристаллической решетки, чем к другим. Для этого соединяют выбранный узел с одним из ближайших (или иногда также и следующими за ближайшими) его соседей отрезком, находят его середину и через нее проводят перпендикулярную данному отрезку плоскость, делящую пространство на два полупространства. Выделяют полупространство, содержащее выбранный узел. Такую операцию повторяют со всеми соседями выбранного узла. Пересечение всех выделенных полупространств и даст ячейку Вигнера-Зейца.

Кристаллографические плоскости. В кристалле большое значение имеют особые *кристаллографические плоскости*, проходящие через узлы кристаллической решетки.

Кристаллографические плоскости принято описывать *индексами Миллера* - набором трех целых чисел, заключенных в круглые скобки (hkl) . Знак минус отрицательного

индекса принято ставить над ним. Эти индексы имеют простой геометрический смысл. Если вдоль трех координатных осей, заданных векторами $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, отложить соответственно отрезки с длинами $a/h, b/k, c/l$ (см. рис. 1.5), то получившиеся три точки однозначно зададут проходящую через них плоскость (hkl) .

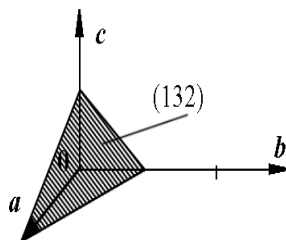


Рис. 1.5. Геометрический смысл индексов Миллера плоскости в кристалле.

Моно- и поликристаллические вещества. Используемые в технике материалы и детали из них сравнительно редко состоят из одной кристаллической решетки. Такие вещества называют *монокристаллическими веществами* (или монокристаллами), то есть состоящими из одного сплошного кристалла.

Наиболее часто используемые материалы, называемые *поликристаллическими* состоят из очень большого числа сросшихся друг с другом монокристаллических зерен. Такая структура материала связана с тем, что кристаллизация веществ как правило начинается и проходит одновременно из большого числа центров кристаллизации. Если принять специальные меры, то возможно получение монокристаллов или из раствора, или из расплава вещества.

1.4 Дифракция в кристаллах.

Изучение атомной структуры вещества основано на явлениях дифракции в нем рентгеновских лучей, электронов или нейтронов. Теория дифракции, изучающая связь картины рассеяния с пространственным расположением атомов, для всех трех излучений одинакова. Для получения дифракционной картины существенно, чтобы длина волны используемого излучения была сравнима со средним межатомным расстоянием. Расстояния между атомами заключены в пределах 1-4 Å. В случае волн видимого света, имеющих длину тысячи ангстрем, дифракция не наблюдается. Рентгеновские лучи, нейтроны и электроны, имеющие длину волны $\sim 1\text{Å}$, дают интерференционные эффекты при рассеянии скоплениями атомов. Дифракционные методы исследования структуры являются расчетными. С помощью дифракции волн в кристалле получают данные о размере элементарной ячейки, положениях ядер и распределении электронов внутри ячейки. Для расчетов необходимо знать положение интерференционных максимумов, возникающих при рассеянии излучения на узлах кристаллической решетки. Дифракцию на кристаллах можно интерпретировать, как “отражение” лучей (при использовании рентгеновского излучения - рентгеновских лучей) плоскостями кристаллической решетки (рис.1.6).

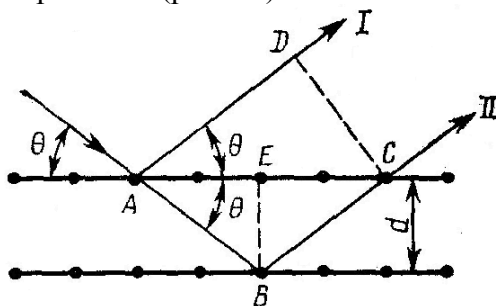


Рис. 1.6.

“Отражение” происходит лишь тогда, когда волны, рассеянные параллельными плоскостями, оказываются в фазе и усиливают друг друга, то есть, когда разность хода при рассеянии от соседних плоскостей равна целому числу n длин волн λ :

$$n\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta. \quad (1.1)$$

Это формула Вульфа-Брэгга, связывающая направления распространения рассеянных пучков (углы θ) с межплоскостными расстояниями d_{hkl} в решетке; n - порядок отражения. Формула Вульфа-Брэгга показывает, что дифракционные пучки для данного d_{hkl} могут быть получены в монохроматическом излучении, то есть при постоянном λ , за счет изменения ориентации кристалла (углов θ), а при неподвижном кристалле - в полихроматическом излучении отражение возникает при соответствующей длине волны λ .

1.5 Межатомное взаимодействие. Основные типы связей в твердых телах. Классификация твердых тел. Энергия связи. Молекулярные, ионные, ковалентные, металлические кристаллы. Электронные волны в кристалле, энергия Ферми, квазичастицы и электронная теплоемкость.

Возможность существования твердого состояния вещества обусловлена возникновением сил взаимодействия между структурными частицами при сближении их на достаточно малые расстояния. Такими частицами могут быть атомы, ионы или молекулы. Для возникновения устойчивой структуры твердого тела необходимо, чтобы между частицами действовали двоякого рода силы: силы притяжения, препятствующие удалению частиц друг от друга, и силы отталкивания, не позволяющие частицам слиться друг с другом. Эти силы имеют электростатическую природу: притяжение между противоположно заряженными частицами (электронами и ядрами) и отталкивание между одноименно заряженными частицами (электронами и электронами, ядрами и ядрами). Характер сил межатомного взаимодействия в первую очередь определяется строением электронных оболочек взаимодействующих атомов.

Наиболее общим видом связи, возникающим между любыми атомами и молекулами, являются силы Ван-дер-Ваальса. В общем случае ван-дер-ваальсова связь включает в себя дисперсионное, ориентационное и индукционное взаимодействие.

Ковалентная связь (валентная или гомеополлярная) образуется за счет взаимодействия между двумя электронами в условиях, когда эти электроны обобществлены парой соседних атомов.

Ионная (полярная) связь образуется в результате кулоновского взаимодействия между положительно и отрицательно заряженными ионами в ионных кристаллах. Типичными представителями ионных кристаллов являются галогениды щелочных металлов, например, со структурой типа NaCl и CsCl.

Металлическая связь возникает при взаимодействии атомов электроположительных элементов, внешние валентные электроны которых связаны с ядром относительно слабо. Связь в решетке металла возникает вследствие взаимодействия положительных ионов с электронным газом.

Водородная связь возникает в том случае, когда атом водорода связан с очень электроотрицательным атомом, например атомом кислорода, фтора, хлора и т.п. Такой атом притягивает электроны связи и приобретает отрицательный заряд; атом водорода, от которого электрон связи оттянут, приобретает положительный заряд. Водородная связь обусловлена электростатическим притяжением этих зарядов.

Характер межатомных связей иногда кладут в основу классификации твердых тел. Согласно этой классификации все твердые тела разделяют на четыре типа: металлические, ковалентные, ионные и молекулярные кристаллы. Кристаллы неорганических веществ с водородной связью (которая по своему характеру является, в основном, ионной) часто выделяют в отдельный тип.

Энергия связи (или энергия сцепления) кристалла это энергия, которая необходима для разделения тела на составные, неподвижные, бесконечно удаленные друг относительно

друга части. При расчете энергии сцепления молекулярных и ионных кристаллов в силу того, что конфигурация электронов в этих кристаллах не сильно отличается от их конфигурации в изолированных атомах или ионах, ограничиваются вычислением классической потенциальной энергии системы сферически симметричных частиц, образующих кристаллическую структуру. Считается, что полная потенциальная энергия системы зависит лишь от расстояния между взаимодействующими частицами, которые локализованы в узлах решетки и кинетическая энергия которых пренебрежимо мала. Полная потенциальная энергия решетки кристалла, содержащего N – частиц,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N U_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^{N-1} U(r_{ij}), \quad (1.2)$$

где U_i - энергия взаимодействия i -ой частицы со всеми другими частицами решетки, $U(r_{ij})$ - потенциальная энергия взаимодействия между частицами в кристалле, расстояние между которыми равно r_{ij} . Полная потенциальная энергия взаимодействия атомов представляется в виде суммы энергии сил притяжения (отрицательный член) и энергии сил отталкивания (положительный)

$$U(r) = U(r)_{\text{пр}} + U(r)_{\text{от}}. \quad (1.3)$$

При некотором значении $r = r_0$ энергия $U(r)$ минимальна, что соответствует силе

$$F = - \left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} = 0. \quad (1.4)$$

В этом случае образуется молекула с наиболее стабильной конфигурацией, при которой сила притяжения уравновешена силой отталкивания $F_{\text{пр}} = F_{\text{от}}$.

Потенциал сил притяжения задается в виде $U_{\text{пр}} = -\frac{a}{r^m}$, где a - положительная константа, m - положительный показатель степени. При $m = 1$ потенциал соответствует обычному кулоновскому взаимодействию между противоположно заряженными ионами, при $m = 6$ - потенциалу притяжения при взаимодействии между атомами инертных газов.

Потенциал сил отталкивания $U_{\text{от}} = \frac{b}{r^n}$, где b и $n > 0$ - постоянные. Полная потенциальная энергия взаимодействия двух атомов

$$U = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}. \quad (1.5)$$

При вычислении энергии сцепления показатель степени n в потенциале сил отталкивания обычно определяют из сжимаемости кристалла α

$$\alpha = -\frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{dP}, \quad (1.6)$$

где V - объем кристалла, P - давление.

Объемный модуль упругости является мерой жесткости кристалла или мерой энергии, требующейся для создания данной деформации

$$B = \frac{1}{\alpha} = V \cdot \left(\frac{d^2U}{dV^2} \right). \quad (1.7)$$

Для описания взаимодействия электрически нейтральных и неполярных молекул используют потенциал Леннарда-Джонса

$$U = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1.8)$$

где ε и σ - константы, связанные с a и b ,

$$\varepsilon = \left(\frac{b}{a}\right)^{1/6}; \quad \sigma = \frac{a^2}{4b}. \quad (1.9)$$

Полная энергия кристаллической решетки ионного кристалла, состоящего из $2N$ ионов, записывается следующим образом:

$$U = -\frac{N\alpha q^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right). \quad (1.9)$$

Величина $\left(-\frac{N \cdot \alpha \cdot q^2}{r_0}\right)$ есть энергия Маделунга. α - постоянная Маделунга, учитывающая вклад в энергию кристалла взаимодействия данной молекулы с ее соседями.

В настоящее время по характеру связи атомов выделяют 5 типов кристаллов: 1) ионные кристаллы 2) ковалентные кристаллы, 3) металлические кристаллы, 4) молекулярные кристаллы с водородными связями, 5) Ван-дер-Ваальсовы кристаллы. Все эти типы, кроме последнего играют очень большую роль в природе и в современной технике. Деление это весьма условно, существуют кристаллы которые можно считать переходными между этими типами, встречаются кристаллы в которых часть связей ковалентная, а часть - водородная. Остановимся на них подробнее.

Ионные кристаллы. *Ионные кристаллы* формируются под влиянием электростатического притяжения разноименно заряженных и отталкивания одноименно заряженных ионов. Типичным примером могут служить вещества **NaCl** и **CsCl** Каждый положительно заряженный ион (**Cs, Na**) стремится окружить себя отрицательно заряженными ионами (**Cl**), а отрицательные ионы окружают себя положительными ионами. Ионы могут сближаться до тех пор пока не начнется перекрытие их электронных облаков, в этом случае появляются силы отталкивания, имеющие квантовую природу.

Ковалентные кристаллы. *Ковалентные кристаллы* образуются за счет ковалентных связей между атомами. Ковалентная связь образуется за счет перекрытия электронных облаков, в результате между атомами образуется сгусток отрицательного заряда, который стягивает два атома. Атом в зависимости от его валентности может иметь несколько таких связей, расположенных под определенными углами друг к другу. Атомы в ковалентном кристалле соединяются за счет ковалентных связей, причем углы между связями и их "длины" могут слегка отличаться для кристаллов с разной структурой.

Типичным ковалентным кристаллом можно считать алмаз. Расчеты энергии связи в случае ковалентных кристаллов достаточно сложны и мы их не рассматриваем.

Металлические кристаллы. В *металлических кристаллах* внешние электроны атомов могут свободно перемещаться между ионными остовами. Эти электроны образуют как бы отрицательно заряженное облако, в котором находятся ионы металла. Взаимодействие этих ионов друг с другом и с электронным облаком ведет к упорядоченному расположению ионов в металле. В случае переходных металлов происходит также и перекрытие их электронных d -оболочек и образование подобия ковалентных связей, ведущее к дополнительному увеличению энергии связи в металле.

Молекулярные кристаллы с водородными связями. В *молекулярных кристаллах с водородными связями* водородная связь образуется между отрицательно заряженными атомами **F, O, N**, уже участвующими в полярной ковалентной связи с другими атомами, когда между ними оказывается ион водорода. Один из перечисленных атомов забирает себе электрон водорода, превращая его в предельном случае в протон, которому иногда энергетически выгоднее оказаться между двумя отрицательно заряженными ионами, чем

быть связанным только с одним из перечисленных атомов. При этом за счет кулоновского притяжения отрицательных ионов к иону водорода образуется сравнительно непрочная связь с энергией порядка 0,1 эВ.

Ван-дер-Ваальсовы кристаллы. *Ван-дер-Ваальсовы кристаллы* образуются из электрически нейтральных атомов за счет диполь - дипольного взаимодействия между ними. Под действием этих связей образуются кристаллы инертных газов при низких температурах, образуя во всех случаях ГЦК плотноупакованную решетку. Эти связи гораздо слабее всех рассмотренных выше и поэтому заметно проявляют себя при отсутствии условий для возникновения ионной, ковалентной металлической или водородной связи.

Модуль 2 «Дефекты конденсированных сред»

2.1. Точечные дефекты. Энергия образования и диффузия точечных дефектов. Равновесная концентрация точечных дефектов. Причины возникновения.

Кристаллы, атомы в которых расположены строго периодически, называют идеальными. Все реальные кристаллы обязательно содержат отклонения от идеальной структуры, такие отклонения принято называть *дефектами структуры*. Дефекты структуры разделяют на динамические и статические. К *динамическим дефектам* относят искажения кристаллической решетки, вызванные тепловыми колебаниями или же колебаниями атомов в поле проходящей через кристалл электромагнитной волны. *Статические дефекты*, рассматриваемые в этой главе, связаны с нарушениями в расположении атомов в кристаллической решетке, например один атом в узле решетки отсутствует или замещен другим, или же атомы перегруппировались и сформировали внутри кристалла более крупный дефект.

Точечные дефекты - самые мелкие дефекты, обычно связаны с "ненормальной" ситуацией вокруг одного атома (отсутствием одного атома, замещением одного атома другим или же появлением "лишнего" атома).

Вакансия. Атом может отсутствовать в некотором узле кристаллической решетки. Такое пустое место называют *вакансией*. Часто вакансия появляется при кристаллизации - случайно один узел оказывается пустым, и, если следующий слой атомов закрывает подход атомов из раствора или расплава к пустому узлу-вакансии, то узел может оказаться пустым. Вакансию часто называют - *дефект по Шотки*.

Междоузельный атом. Атом может разместиться не в узле кристаллической решетки, а в промежутке между атомами - *междоузлии*, такой дефект называют *междоузельным атомом*. Появляется междоузельный атом, как и вакансия, часто при кристаллизации - случайно один из атомов в результате теплового движения попадет в промежуток между соседними атомами, и, если его место займет какой либо другой атом, то междоузельный атом так и останется в новом ненормальном положении.

Дефект по Френкелю. Часто вакансия и междоузельный атом возникают парами (см. рис. 2.1 (3)), в этом случае один из атомов перескакивает из узлового положения в соседнее междоузлие. Причиной такого перескока может быть тепловое движение при сравнительно высоких температурах, порядка температуры плавления, или выбивание атома быстродвижущейся частицей (радиационный дефект). Такая пара дефектов называется *дефектом по Френкелю*.

Атом примеси. Один из атомов может быть замещен атомом примеси (см. рис. 2.1 (4)), при этом также получается дефект, называемый *примесным атомом замещения*. Примесный атом может разместиться и в междоузлии (см. рис. 2.1 (5)), как бы внедрившись в него. Такой дефект, называемый *примесным атомом внедрения*, часто появляется в случае, когда атом примеси значительно меньше атомов кристалла и в решетке кристалла имеются междоузлия достаточного размера; часто примесями внедрения оказываются атомы водорода, бора, углерода. Если атом примеси превосходит по размерам атомы кристалла, то, как правило, он замещает атомы кристалла.

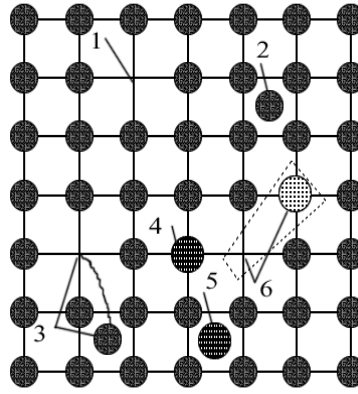


Рис. 2.1. Типы точечных дефектов: 1 - вакансия; 2 - межузельный атом; 3 - дефект по Френкелю; 4 - примесный атом замещения; 5 - примесный атом внедрения; 6 - атом замещения большей валентности

Энергия точечного дефекта и вероятность его образования. С точечным дефектом связана энергия E_f образования дефекта: в случае вакансии (это энергия, необходимая для удаления атома на поверхность кристалла; в случае внедренного атома - энергия необходимая для перемещения атома с поверхности кристалла в междоузлие. Как правило, она составляет примерно 1 эВ.

Влияние точечных дефектов на диффузию. Точечные дефекты оказывают наиболее значительное влияние на скорость диффузии в кристаллах и на электропроводность в диэлектрических кристаллах. Остановимся, прежде всего, на возможных механизмах диффузии в кристаллах.

Атомы в кристаллах могут перескакивать из одного положения в другое. Возможные варианты таких перескоков изображены на рис. 2.2.

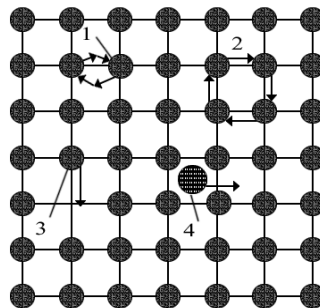


Рис. 2.2. Наиболее распространенные механизмы диффузии атомов в кристаллах: 1 - обмен местами двух соседних атомов; 2 - обмен местами нескольких соседних атомов; 3 - перескок атома в вакансию; 4 - перескоки межузельных атомов в соседние междоузлия

Во всех случаях диффузии атомы должны преодолевать потенциальный барьер; происхождение которого связано главным образом с квантовыми силами отталкивания, сильно увеличивающимися при сближении атомов. Рассмотрим наиболее простой для анализа случай перескакивания межузельного атома в соседнее междоузлие.

Таким образом, атом в твердых телах перемещается редкими прыжками, на расстояние a и частотой f как это схематически показано на рис 2.3.

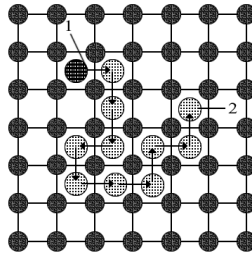


Рис. 2.3. Схематическое изображение процесса диффузии межузельных атомов в примитивной кубической решетке

С помощью такой модели движения атомов рассчитаем коэффициент диффузии межузельных атомов в случае простой кубической решетки с параметром a . Пусть частота перескоков из данного междоузлия в соседнее равна f .

Вспомним закон диффузии Фика, связывающий поток числа атомов dN/dt через площадку S и градиент концентрации dC/dx :

$$dN/dt = -DS(dC/dx) \quad (2.1)$$

Параметр D называется коэффициентом диффузии. Он зависит от типа диффундирующего атома и вещества, в котором происходит диффузия заданных атомов.

Общим для всех случаев диффузии, изображенных на рис. 2.3, окажется экспоненциальная зависимость коэффициента диффузии от температуры вида:

$$D = D_0 \exp(-E_a/kT) \quad (2.2)$$

Параметры D_0 и E_a этой формулы измерены экспериментально для каждой пары диффундирующий элемент - вещество, в котором происходит диффузия.

Диффузия, происходящая главным образом за счет перемещения дефектов, является механизмом постепенного изменения числа дефектов в веществе. Однако обычно число дефектов во много раз больше, так как дефекты зарождались при высоких температурах: либо во время роста кристаллов, либо после закалки от высокой температуры. Постепенно плотность дефектов уменьшается. Происходит это благодаря либо попаданию межузельных атомов в вакансию (рекомбинация дефектов, подобная рекомбинации электронов и дырок в полупроводниках), либо благодаря перемещению дефекта на поверхность кристалла или границы кристаллического зерна. В некоторых случаях точечные дефекты - примесные атомы группируются, образуя выделения новой фазы. Перечисленные процессы называют залечиванием дефектов.

2.2 Линейные дефекты. Дислокации. Контур и вектор Бюргера. Напряжения, необходимые для образования дислокаций в совершенном кристалле. Движение дислокаций. Напряжения, связанные с дислокациями. Энергия дислокаций. Взаимодействие дислокаций между собой и с точечными дефектами. Источники дислокаций.

Подробное изучение *линейных дефектов* кристаллической решетки, называемых *дислокациями*, связано с их сильным влиянием на прочность и пластичность практически всех конструкционных кристаллических материалов. Теории прочности кристаллов, не учитывающие этот тип дефектов, не могли даже приблизительно объяснять наблюдающиеся механические свойства как моно- так и поликристаллических веществ.

Типы дислокаций. Дислокации принято разделять на краевые и винтовые, хотя, строго говоря, наблюдаемые дислокации только иногда могут быть отнесены к одному из этих модельных типов дислокаций, поскольку обычно содержат элементы и того и другого типа. Начнем рассмотрение с этих двух наглядных модельных дислокаций. Для простоты будем

рассматривать простую кубическую решетку, хотя полученные результаты справедливы с незначительными изменениями и для решеток других типов.

Краевая дислокация представляет собой особое расположение атомов, изображенное для случая простой кубической решетки на рис 2.4. На этом рисунке изображена "лишняя половинка" плоскости, помещенная между двумя другими целыми соседними плоскостями типа 100. Атомы этих целых плоскостей восстановили связи друг с другом, при этом вблизи края вставленной полуплоскости возникли очень сильные деформации. Линию, проходящую через край лишней полуплоскости, называют линией краевой дислокации, а иногда просто краевой дислокацией. По этой причине дислокацию относят к линейным дефектам.

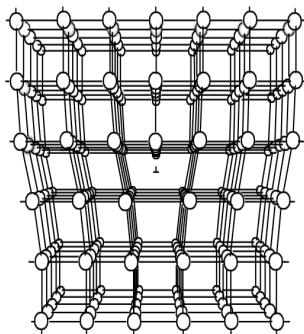


Рис. 2.4. Схема расположения атомов вблизи краевой дислокации

Винтовая дислокация. *Винтовая дислокация* представляет собой особое расположение атомов для случая простой кубической решетки. На этом рисунке атомы, расположенные слева от половинки плоскости А, остались на месте, а атомы справа от нее смещены вниз на одно межплоскостное расстояние. При этом вблизи линии В возникли очень сильные деформации. Линию В, проходящую через границу полуплоскости А и оставшейся полуплоскости также называют винтовой дислокацией. Поэтому винтовые дислокации бывают правовинтовые и левовинтовые.

Вектор Бюргерса. Винтовую дислокацию можно получить с помощью следующей модельной операции над кристаллом (см. рис. 2.5 а). На кристалле по плоскости (100) сделаем мысленный разрез по полуплоскости А, проходящей между узлами кристаллической решетки.

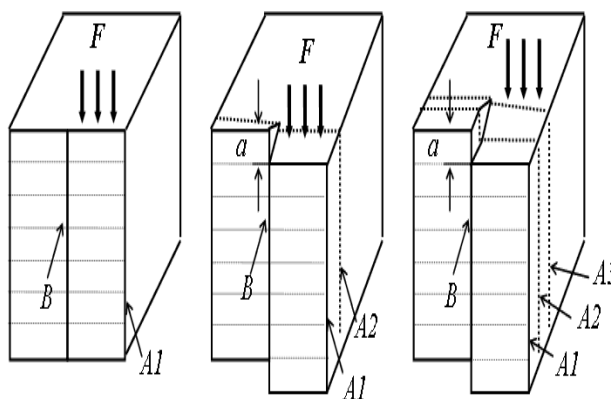


Рис. 2.5. Схема зарождения и перемещения винтовой дислокации при сдвиговой деформации кристалла

Затем атомы, находящиеся справа от нее сместим вниз на одно межплоскостное расстояние и снова соединим атомы связями, проходящими через А. Вектор смещения "левой" части кристалла относительно "правой" является *вектором Бюргерса* \vec{b} винтовой дислокации \vec{B} . Видно, что вектор Бюргерса винтовой дислокации параллелен этой дислокации.

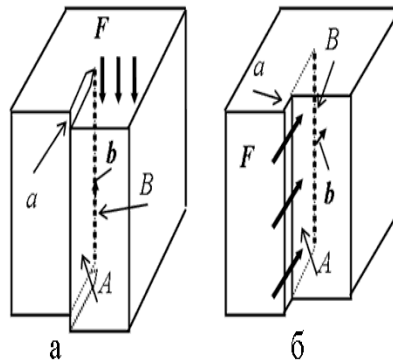


Рис. 2.6. Схема смещения атомов кристалла в случае винтовой и краевой дислокации. \vec{b} - вектор Бюргера

Дислокации смешанного типа. На рис. 2.7 приведен пример *криволинейной дислокации смешанного типа*, соединяющей точки А и В. Видно, что в точке А расположение атомов отвечает краевой, а в точке В - винтовой дислокации. Такая дислокация может быть получена сдвиговой неоднородной деформацией под действием силы \vec{F} в направлении \vec{b} (см. рис. 2.7), в результате которой только часть атомных связей в местах, отмеченных на рис. 2.7 штриховкой, разорвутся и соединятся со смещением на вектор \vec{b} .

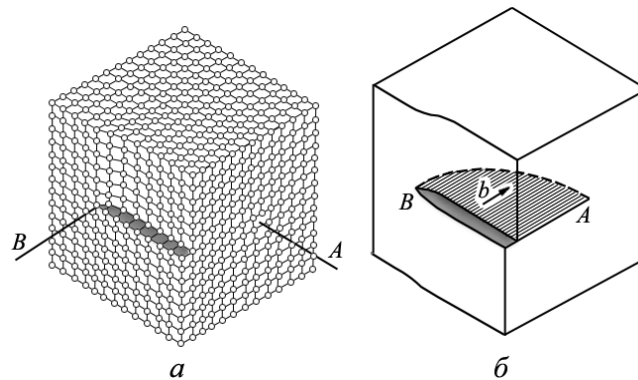


Рис. 2.7. Криволинейная дислокация смешанного типа

Энергия дислокаций. С дислокацией связана энергия деформации кристаллической решетки, которую можно вычислить, используя приближение сплошной среды для удаленных от дислокации участков кристалла и модель взаимодействующих атомов для малых расстояний от дислокации.

$$U = (b^2 l \mu / 4\pi) \ln(R_0 / r_0) \quad (2.5)$$

В этой формуле следует положить r_0 равным примерно периоду решетки, а R_0 - среднему расстоянию между дислокациями, равному 100-200 периодам решетки. Впрочем, большой точности здесь не требуется, так как отношение R_0 / r_0 находится под знаком логарифма и результат наш - оценочный.

Взаимодействие дислокаций. Дислокация создает поля деформаций, которые могут воздействовать на другие дислокации. Взаимодействие дислокаций и точечных дефектов. Дислокация, особенно краевая, создает сильно сжатые и сильно растянутые участки кристаллической решетки. В растянутые места энергетически выгоднее переместиться крупным атомам примеси замещения, а в сжатые - мелким атомам примеси замещения. Атомам внедрения, особенно крупным, также выгоднее перемещаться в область растянутой кристаллической решетки вблизи дислокации. В таком случае вблизи дислокации образуется

скопление примесей, называемое "шубой дислокации", которое уменьшает локальную деформацию вблизи дислокации и энергию дислокации.

Точечные дефекты часто исчезают, попав на край "лишней" полуплоскости, создающей дислокацию; при этом изменяется форма края этой "полуплоскости". Также считают, что дислокации при движении способны порождать точечные дефекты, особенно вакансии, появляющиеся вблизи края лишней плоскости; при этом изменяется форма края этой "полуплоскости". Линия дислокации в таких процессах (называемых переползанием дислокации) смещается (переползает) на новое место.

Эксперименты показывают, что пластическая деформация происходит в первую очередь вдоль так называемых *плоскостей скольжения* (атомных плоскостей, наиболее густо заселенных атомами. Если к верхней плоскости приложить тангенциальное усилие, то атомы сместятся, и появится сила упругости, равная приложенной. С этой силой будет связана энергия деформации, которая будет возрастать до тех пор, пока атомы верхней плоскости не окажутся "над" атомами нижней плоскости - в точке *В*. При дальнейшем смещении атомам будет уже выгоднее "спуститься" в положения *С*. Таким образом верхняя плоскость может проскользнуть на новое положение. Следы таких проскальзываний хорошо видны на поверхности тщательно отшлифованных монокристаллов в виде "ступенек" после пластической деформации.

Происхождение дислокаций. Как уже отмечалось, дислокации появляются главным образом в результате пластической деформации кристаллов. Одним из источников дислокаций при пластической деформации считают источник Франка-Рида, схематически изображенный на рис. 2.7. Пусть дислокация 1 закреплена в точках *А* и *Б*. Такими точками могут быть скопления атомов иного размера, область другой фазы и т.п. При приложении внешнего механического напряжения дислокация перемещается, последовательно занимая положения 2, 3, 4. Наконец в положении 5 левая и правая полупетли дислокации схлопываются, образуя дислокационную петлю 6 округлой формы, которая под влиянием механического напряжения примет форму 1, а далее процесс повторится и зародится следующая дислокация и так далее.

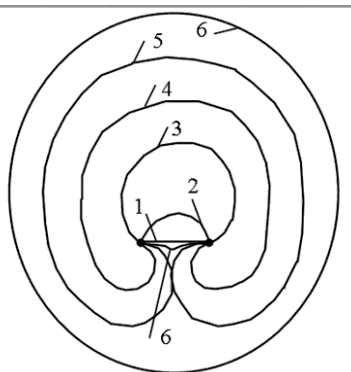


Рис. 2.7. Источник дислокаций Франка-Рида

Также замкнутые дислокации появляются при образовании дископодобных скоплений вакансий при охлаждении кристалла.

На поверхности достаточно совершенных кристаллов часто наблюдают следы подобных ступенек.

2.3 Двумерные дефекты.

Поверхностные дефекты. Поверхность кристалла является самым очевидным примером поверхностного дефекта. Известно, что вблизи поверхности кристалла нарушается в некоторой степени периодическое расположение атомов. Из-за этого поверхностный слой находится в напряженном состоянии и обладает некоторой поверхностной энергией, подобно тому как и поверхность жидкости обладает энергией поверхностного натяжения. Стремление кристалла как любой системы иметь минимум энергии приводит к минимальной

поверхности кристалла. Отчасти поэтому кристаллы имеют форму выпуклых многогранников.

Однако поверхностные дефекты встречаются и внутри кристалла. Это связано с тем, что большинство реальных кристаллов формируются одновременно из нескольких центров кристаллизации и поэтому состоят из зерен с близкой ориентацией кристаллических решеток.

Существуют и другой тип границ - границы между кристаллическими зернами в поликристаллическом материале. В этом случае разориентировка кристаллических решеток соседних зерен бывает произвольной.

Границы зерен кристалла с нарушенной кристаллической решеткой находятся обычно в напряженном состоянии. Поэтому именно вблизи границ зерен кристалла под действием внешних, дополнительных механических напряжений и происходит чаще всего разлом кристалла.

Вдоль границ зерен быстрее проходит диффузия атомов (так называемая *межзеренная диффузия*), и, в частности, атомов газов, способных вызывать нежелательные химические реакции с атомами кристалла. Из-за этого ухудшается коррозионная стойкость изделий из кристаллических веществ. Продукты этих реакций (например оксиды, нитриды и др.) будут дополнительно искажать кристаллическую решетку вблизи границ зерен, из-за чего неизбежно повысится вероятность разлома кристалла вдоль границ его зерен и в целом его хрупкость.

2.4 Трехмерные дефекты.

Объемные дефекты. К объемным дефектам относят микровключения других фаз, поры и трещины. Последние два типа дефектов - крайне нежелательны для материала, поскольку искажают практически все его физические свойства, причем наиболее значительно ухудшают прочность и пластичность изделий.

Микровключения других фаз широко используют для улучшения прочности материала. В таком случае специально создают структуру подобную железобетону, состоящую из вещества основной фазы и упрочняющей фазы. Наилучшие результаты получаются, если кристаллические решетки обеих фаз "удачно стыкуются" вдоль некоторых плоскостей. Примерами могут служить сплавы алюминия с медью и алюминия с литием.

Модуль 3 «Упругие свойства кристаллов»

3.1 Напряженное и деформированное состояние твердых тел.

Механические свойства твердого тела отражают его реакцию на воздействие некоторых внешних факторов. В простейшем случае такими внешними факторами являются механические воздействия: сжатие, растяжение, изгиб, удар, кручение. Механические свойства определяются, в первую очередь, силами связи, действующими между атомами или молекулами, составляющими твердое тело. При действии на кристалл внешней растягивающей нагрузки расстояние между атомами увеличивается, и равновесное расположение их в кристалле нарушается. Это приводит к нарушению равенства сил притяжения и отталкивания, характерного для равновесного состояния атомов в решетке, и возникновению внутренних сил, стремящихся вернуть атомы в первоначальные положения равновесия. Величину этих сил, рассчитанную на единицу площади поперечного сечения кристалла, называют напряжением: $\sigma = F_{\text{вн.}}/S$, где $F_{\text{вн.}}$ - внешняя сила, S - площадь поперечного сечения кристалла. При однородном напряжении (одинаковом во всех точках тела) при равновесии силы, действующие на противоположные грани равны. Поэтому рассматриваются только силы, действующие на три взаимно перпендикулярные грани. Каждое из напряжений, действующих на три непараллельные грани куба, раскладывается на одну нормальную составляющую и две касательные, т.е. лежащие в рассматриваемой грани. Нормальные напряжения σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} - растягивающие или сжимающие, касательные - σ_{12} , σ_{21} , σ_{23} и т.д. - скалывающие или сдвиговые. Касательные напряжения способствуют

развитию пластической деформации, а нормальные - разрыву межатомных связей, хрупкому разрушению твердого тела. Имеется девять компонент тензора механических напряжений:

$$T_{\text{напр.}} = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix}. \quad (3.1)$$

Так как элементарный куб находится в состоянии равновесия и напряжение однородно, то $\sigma_{23} = \sigma_{32}$; $\sigma_{31} = \sigma_{13}$; $\sigma_{12} = \sigma_{21}$. Таким образом, из 9-ти компонент тензора напряжений только шесть являются независимыми и тензор оказывается симметричным $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

Деформация это изменение объема или формы твердого тела без изменения его массы под действием внешней силы. Это процесс, при котором изменяется расстояние между какими-либо точками тела. Относительная деформация тела $\varepsilon = (l_k - l_0) / l_0$, где l_0 - начальная длина тела; l_k - длина после приложения растягивающей силы. Деформация в любой точке есть производная смещения по координате (безразмерная величина) $\varepsilon = du/dx$. Тензор деформации является симметричным тензором второго ранга, он определяет деформированное состояние в данной точке тела. Из 9-ти компонент тензора деформации шесть являются независимыми

$$T_{\text{деф}} = \begin{vmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} e_{11} & \frac{1}{2}(e_{12} + e_{21}) & \frac{1}{2}(e_{13} + e_{31}) \\ \frac{1}{2}(e_{21} + e_{12}) & e_{22} & \frac{1}{2}(e_{23} + e_{32}) \\ \frac{1}{2}(e_{31} + e_{13}) & \frac{1}{2}(e_{32} + e_{23}) & e_{33} \end{vmatrix}. \quad (3.2)$$

Диагональные компоненты ε_{ii} описывают удлинение или сжатие, а недиагональные компоненты ε_{ij} описывают сдвиг.

3.2 Упругость Закон Гука для изотропных и анизотропных твердых тел. Тензоры напряжений и деформаций, обобщенный закон Гука

1. Для изотропных твердых тел. При растяжении изотропного тела (для изотропного тела любые произвольно выбранные направления эквивалентны), когда деформация и напряжения достаточно малы, деформация пропорциональна напряжению: $\varepsilon = S\sigma$, S - константа упругой податливости (податливость). $1/S = C$ - константа упругой жесткости (жесткость, модуль Юнга $E = C$).

Поперечная деформация при упругом растяжении или сжатии характеризуется коэффициентом Пуассона ν , равным отношению изменения размеров в поперечном направлении к их изменению в продольном направлении:

$$\nu = \frac{(r_1 - r_0) / r_0}{(l_1 - l_0) / l_0} = - \frac{dr / r_0}{dl / l_0}. \quad (3.3)$$

Существует связь между константами упругости и коэффициентом Пуассона $G = E / [2(1 + \nu)]$. Зная две константы, всегда можно определить третью.

Обобщенный закон Гука устанавливает линейную зависимость не только между одним напряжением и соответствующей деформацией, но и между компонентами тензора напряжений и каждым компонентом тензора деформации. Обобщенный закон Гука для изотропного тела записывается таким образом:

Для удлинений

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11} = \varepsilon_x &= \frac{1}{E} [\sigma_{11} - \nu(\sigma_{22} + \sigma_{33})] = \frac{1}{E} [\sigma_x - \nu(\sigma_y + \sigma_z)]; \\ \varepsilon_{22} = \varepsilon_y &= \frac{1}{E} [\sigma_{22} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{33})] = \frac{1}{E} [\sigma_y - \nu(\sigma_x + \sigma_z)]; \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\varepsilon_{33} = \varepsilon_z = \frac{1}{E} [\sigma_{33} - \nu(\sigma_{11} + \sigma_{22})] = \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_x + \sigma_y)].$$

Для сдвигов

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{xy} = \sigma_{12}/G = \tau_{xy}/G; \varepsilon_{23} = \varepsilon_{yz} = \sigma_{23}/G = \tau_{yz}/G; \varepsilon_{31} = \varepsilon_{zx} = \sigma_{31}/G = \tau_{zx}/G. \quad (3.5)$$

Для анизотропных тел. Для монокристаллов любые произвольно выбранные направления по свойствам неэквивалентны. Если деформация бесконечно мала и однородна, то каждая компонента тензора деформации линейно связана со всеми компонентами тензора напряжений и, наоборот, каждая компонента тензора напряжений линейно связана со всеми компонентами тензора деформаций. В этом заключается сущность закона Гука для анизотропных тел:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad \text{либо} \quad (3.6)$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (3.7)$$

где S_{ijkl} и C_{ijkl} - тензоры упругой податливости и упругой жесткости соответственно.

Так как тензоры деформации и напряжения являются симметричными тензорами второго ранга, то независимых компонент S_{ijkl} и C_{ijkl} будет 36. Наличие равенств $S_{ijkl} = S_{klij}$ и $C_{ijkl} = C_{klij}$, приводит к сокращению независимых компонент до 21. Столько констант имеет твердое тело, не обладающее никакой симметрией. Для кристаллов с кубической симметрией полное число упругих констант равно 3, так как направления $\pm x$, $\pm y$, $\pm z$ взаимно перпендикулярны и полностью эквивалентны. Набор постоянных упругой жесткости сводится к матрице:

$$C_{ij} = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{vmatrix}. \quad (3.8)$$

Между константами податливости и жесткости в зависимости от симметрии кристалла имеется определенная форма соотношения. Для кристаллов кубической сингонии

$$C_{11} = \frac{S_{11} + S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})}; \quad C_{12} = \frac{-S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})}; \quad C_{44} = \frac{1}{S_{44}}; \quad (3.9)$$

Плотность упругой энергии. Плотность упругой энергии U в приближении закона Гука является квадратичной функцией деформации:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^6 \sum_{\mu=1}^6 \tilde{C}_{\lambda\mu} e_{\lambda} e_{\mu} \quad (3.10)$$

Где индексы от 1 до 6 определяются таким образом: 1 = xx; 2 = yy; 3 = zz; 4 = z; 5 = zx; 6 = xy. Коэффициенты \tilde{C} связаны с коэффициентами C $C_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\tilde{C}_{\alpha\beta} + \tilde{C}_{\beta\alpha}) = C_{\beta\alpha}$. Плотность упругой энергии кубического кристалла записывается в виде

$$U = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) + C_{12} (e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx} + e_{xx} e_{yy}). \quad (3.11)$$

При однородном расширении $e_{xx} = e_{yy} = e_{zz} = \delta/3$. Тогда энергия: $U = \frac{1}{6} (C_{11} + 2C_{12}) \delta^2$.

Или: $U = \frac{1}{2} B \delta^2$, где $B = (k^2 + k^2 + l^2)_{\max} = \frac{4k^2}{3}$ - объемный модуль упругости для кубического кристалла. Величина, обратная объемному модулю упругости, есть сжимаемость $\alpha = 1/B$. Зная значения упругих постоянных кристаллов, можно определить скорости распространения упругих волн (поперечных и продольных) и наоборот.

3.3 Пластические свойства кристаллических твердых тел. Хрупкое разрушение.

Под действием приложенных внешних сил твердые тела изменяют свою форму и объем - деформируются. Если после прекращения действия силы, форма и объем тела полностью восстанавливаются, то деформацию называют *упругой*, а тело - абсолютно упругим. Деформации, которые не исчезают после прекращения действия сил, называются *пластическими*, а тела - пластичными.

Различают следующие виды деформаций: растяжение, сжатие, сдвиг, кручение и изгиб. Деформацию растяжения характеризуют абсолютным удлинением Δl и относительным удлинением ε :

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{l - l_0}{l_0},$$

где l_0 - начальная длина, l - конечная длина стержня. Механическим напряжением называют отношение модуля силы упругости F к площади поперечного сечения тела S : $\sigma = F/S$.

На рис.3.1 представлен график зависимости механического напряжения от относительного удлинения.

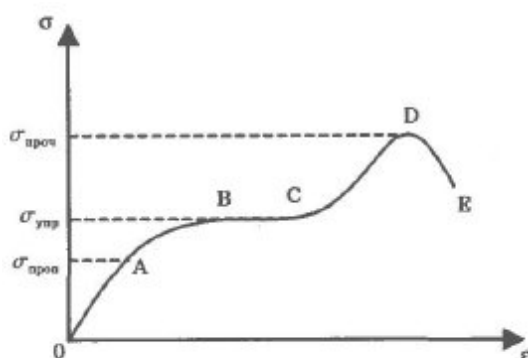


Рис. 33

Участок 0A - область пропорциональности: на этом участке выполняется закон Гука. Точке A соответствует напряжение $\sigma_{\text{проп}}$, называемое пределом пропорциональности. Предел пропорциональности $\sigma_{\text{проп}}$ - максимальное напряжение, при котором закон Гука еще выполняется.

Предел упругости $\sigma_{\text{упр}}$ - напряжение, при котором тело полностью утрачивает упругость (участок AB).

На участке BC наблюдается явление "текучести" материала: удлинение тела нарастает при незначительном росте деформирующей силы.

При дальнейшем увеличении удлинения тело вновь обретает способность сопротивляться деформации; напряжение в нем вновь увеличивается, достигая максимума в точке D, которой соответствует начало разрушения.

Предел прочности $\sigma_{\text{проч}}$ - наибольшее напряжение, возникающее в теле перед началом разрушения. Участку DE соответствует постепенное разрушение тела.

Все детали машин и механизмов изготавливаются со значительным, но разумным запасом прочности.

Отношение предела прочности материала (или предела текучести для пластичных тел) к фактически действующему напряжению называют коэффициентом запаса прочности (k). Например, в строительном деле коэффициент запаса прочности стальных балок установлен не менее 2,5 - 2,6, а для балок из хрупких материалов (чугун, бетон) не менее 3 - 9.

Механические свойства материалов различны. Такие материалы, как резина или сталь, обнаруживают упругие свойства при сравнительно больших напряжениях и деформациях. Их называют упругими.

Большое значение на практике имеет такое свойство твердых тел, как хрупкость. Материалы называют хрупкими, если они разрушаются при небольших деформациях (чугун, фарфор).

Важной характеристикой материалов является твердость. Она характеризует способность материала оказывать сопротивление проникновению в него другого тела, т. е. способность противодействовать вдавливанию или царапанию.)

Под хрупким разрушением (ХР) твердых тел понимают наступающее при соответствующих условиях необратимое нарушение сплошности вследствие распространения в теле макроскопических трещин, приводящего к тому, что тело распадается на части, причем образовавшиеся после разрушения части можно сложить так, чтобы составленное из них тело совпадало с исходным.

Развитие трещины при хрупком разрушении

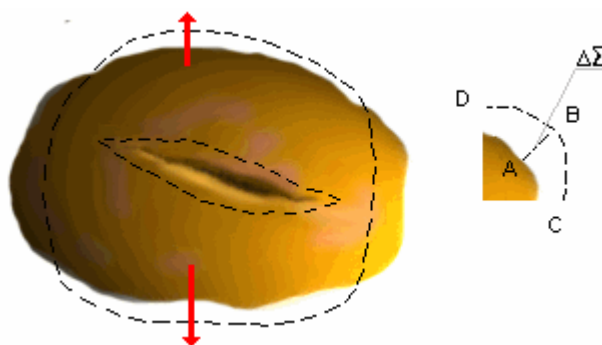


Рис. 3.2

При рассмотрении процесса хрупкого разрушения постоянная U_0 учитывает эффекты, проявляющиеся при разрушении тела, и характеризует полную энергию сил сцепления. Данная энергия аналогична гравитационной энергии притягивающихся масс, однако U_0 для реальных тел слабо зависит от глобальной геометрической формы тела. Это обусловлено тем, что внутренние силы сцепления имеют электромагнитную природу и являются короткодействующими. Между тем, именно эти силы и соответствующая им энергия обеспечивают крепость соединения частей тела - т.е. прочность материала. Вот почему при образовании разрывов необходимо учитывать изменение U_0 .

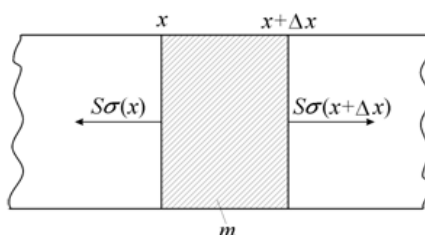
Отметим, что модель упругого тела для малых деформаций (по закону Гука) неприемлема для описания процесса ХР непосредственно вблизи концов трещин.

Модуль 4 «Динамика кристаллической решетки»

4.1 Одномерные колебания однородной струны.

Рассмотрим однородную бесконечную струну с линейной плотностью ρ , вдоль которой может распространяться продольная волна. Обозначим σ нормальные упругие напряжения, возникающие в струне. Тогда на элемент струны длиной Δx и площадью поперечного сечения S (рис. 4.1) действуют силы: $S\sigma(x)$ слева и $S\sigma(x+\Delta x)$ справа. Результирующая сила, действующая на этот элемент струны, будет

$$F = S\sigma(x+\Delta x) - S\sigma(x) \quad (4.1)$$



Результат действия силы F заключается в смещении центра масс элемента Δx , которое обозначим $u(x,t)$. Тогда, приняв $\rho S \Delta x = m$ массу элемента, где ρ – плотность материала струны, в соответствии со вторым законом Ньютона можно записать уравнение движения

$$\rho S \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = S \sigma(x + \Delta x) - S \sigma(x) \quad (4.2)$$

где $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ – ускорение.

Поделив обе части уравнения (4.2) на Δx и, приняв условие малости этого элемента $\Delta x \rightarrow 0$, получим

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma}{\partial x} \quad (4.3)$$

Как было показано в главе 4, закон Гука для изотропных твердых тел имеет вид

$$\sigma = E \varepsilon, \quad (4.4)$$

где E – модуль Юнга, (отношение силы F , действующей на тело, к величине относительного

удлинения $\Delta l/l$), а ε – деформация. Поскольку $\varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}$, то можно записать

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = E \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} = E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.5)$$

Окончательно уравнение движения для смещения $u(x,t)$ примет вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{E}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (4.6)$$

Уравнение (5.6) соответствует упругой волне, распространяющейся вдоль однородной струны. Решение этого уравнения можно найти в виде продольной монохроматической волны

$$u = u_0 \sin(kx - \omega t), \quad (4.7)$$

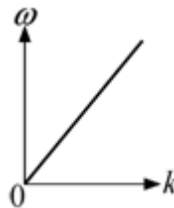
где u_0 – амплитуда колебаний, k – волновое число, равное $2\pi/\lambda$ (λ – длина волны), ω – циклическая частота колебаний, t – время.

Найдем зависимость частоты от волнового числа, подставив решение (4.7) в уравнение движения (4.6).

$$\omega = k \sqrt{\frac{E}{\rho}} = k v, \quad (4.8)$$

где v – скорость распространения волны вдоль струны.

Из формулы (4.8) следует, что для упругой волны, распространяющейся вдоль бесконечной однородной упругой струны, частота колебаний линейно зависит от волнового числа (рис. 4.2).



$$v = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

Скорость распространения волны $v = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$ для данного материала струны величина постоянная, поскольку модуль упругости E и плотность ρ характеризуют конкретный

материал. Например, в железной струне с $E = 2,1 \cdot 10^{11}$ Па и $\rho = 7,8 \cdot 10^3$ кг/м³ скорость волны составит значение $v = 5 \cdot 10^3$ м/с.

4.3 Колебания одноатомной линейной цепочки.

Случай одноатомной ячейки. Рассмотрим для простоты кубический кристалл с примитивной элементарной ячейкой с периодом a с базисом, состоящим из одного атома. В этом кристалле рассмотрим направление $[100]$ и плоскую продольную волну (случай поперечной волны рассматривается подобным же образом), распространяющуюся вдоль этого направления (см. рис. 4.2).

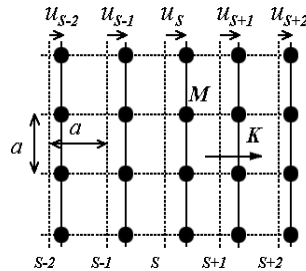


Рис. 4.2 Колебания атомов одноатомной кубической решетки в продольной плоской волне, распространяющейся вдоль направления $[100]$

В таком случае атомы, расположенные в одной плоскости (100) с номером s , будут смещаться на величину u_s с одной фазой вдоль нормали к этой плоскости (вдоль $[100]$), то есть вся плоскость атомов будет колебаться как целое. На выбранный атом в этой плоскости с номером s будет действовать другая плоскость с номером $s+p$ силой F_p . В случае малых смещений u_s можно предположить, что эта сила пропорциональна разности смещений $u_{s+p} - u_s$ взаимодействующих плоскостей от их положения равновесия. Результирующая сила F_s будет суммой сил F_p :

$$F_s = \sum_{p=0} F_p = \sum_{p=0} C_p (u_{s+p} - u_s) \quad (4.9)$$

Запишем второй закон Ньютона для атома с массой M , находящегося на плоскости с номером s :

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{p=0} C_p (u_{s+p} - u_s) \quad (4.10)$$

Будем искать функцию u_s в виде плоской продольной волны:

$$u_{s+p} = u_p \exp(-i\omega t + iKx) = u_p \exp(-i\omega t) \exp(iKa(s+p)) \quad (4.11)$$

$$M\omega^2 = -\sum_{p=0} C_p (\exp(ipKa) - 1) \quad (4.12)$$

С учетом симметрии рассматриваемой решетки $C_p = C_{-p}$ и соотношения $\cos(\alpha) = (\exp(i\alpha) + \exp(-i\alpha)) / 2$ получаем выражение:

$$\begin{aligned} \omega^2 M &= -\sum_{p>0} C_p (\exp(ipKa) + \exp(-ipKa) - 2) = \\ &= 2 \sum_{p>0} C_p (1 - \cos(pKa)). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Часто ограничиваются рассмотрением взаимодействия выделенного атома только с ближайшими плоскостями. Тогда $p = \pm 1$, и выражение для ω^2 упрощается:

$$\omega^2 = (2/M)C_1(1 - \cos(pKa)) = (4C_1/M)(\sin(Ka/2))^2. \quad (4.14)$$

График зависимости $\omega(K)$ приведен на рис. 3.6. Видно, что в точке $K = \pi/a$, соответствующей границе первой зоны Бриллюэна, производная $\omega(K)$ по K равна нулю, что соответствует равенству нулю групповой скорости фонона.

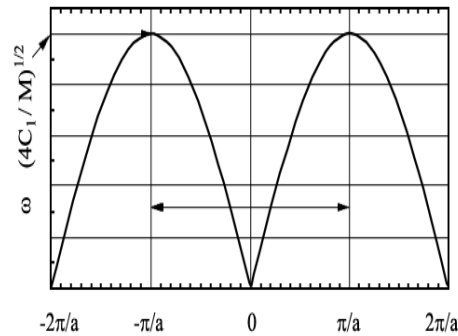


Рис. 4.3 Зависимость частоты (от волнового вектора K для случая продольной плоской волны, распространяющейся вдоль направления $[100]$ в примитивной кубической решетке

В случае трехмерной решетки фононы способны отражаться и от атомных плоскостей подобно рентгеновским лучам; условие интерференционного усиления примет в этом случае вид уравнения Вульфа-Брегга.

4.4 Колебания одномерной решетки с базисом.

Колебания атомов в ячейке с базисом из двух атомов. Рассмотрим для простоты изложения кубический кристалл с примитивной элементарной ячейкой с периодом a и с базисом, состоящим из двух атомов (рис. 4.4). Пусть атомы имеют массы M_1 и M_2 .

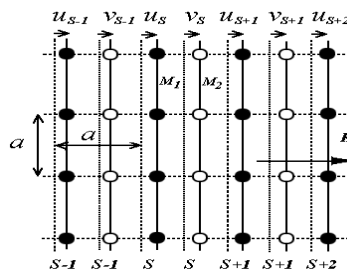


Рис. 4.4. Колебания атомов кубической решетки с базисом из двух атомов в продольной плоской волне, распространяющейся вдоль направления $[100]$

В этом кристалле рассмотрим направление $[100]$ и плоскую продольную волну (случай поперечной волны рассматривается подобным же образом), распространяющуюся вдоль этого направления. В таком случае зачерненные на рис. 4.4 атомы с массой M_1 , расположенные в одной плоскости (100) с номером s , будут смещаться на величину u_s с одной фазой вдоль нормали к этой плоскости (вдоль направления $[100]$), то есть вся плоскость атомов будет колебаться как целое. Аналогично светлые атомы (см. рис. 4.4) с

массой M_2 , расположенные в одной плоскости с номером s , будут смещаться на величину v_s с одной фазой вдоль нормали к этой плоскости вдоль $[100]$, то есть вся плоскость атомов будет также колебаться как целое. Сделаем важное дополнительное упрощение: предположим, что на один выбранный атом в плоскости с номером s будут действовать только атомы двух ближайших плоскостей.

В случае малых смещений u_s и v_s можно предположить, что сила, действующая со стороны атомов ближайших плоскостей, пропорциональна разности смещений $u_{s+1} - v_s$ и $v_s - u_s$ (для светлых атомов) и $u_s - v_{s-1}$ и $v_s - u_s$ (для темных атомов) ближайших плоскостей от их положения равновесия.

Запишем второй закон Ньютона для "темного" и "светлого" атома (см. рис. 4.4) плоскости с номером s

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C((v_{s-1} - u_s) + (v_s - u_s));$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C((u_{s+1} - v_s) + (u_s - v_s)).$$
(4.15)

Будем искать функции u_s и v_s в виде плоской продольной волны:

$$u_s = u_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKas); \quad v_s = v_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKas)$$
(4.16)

$$-\omega^2 M_1 u = Cv(1 + \exp(-iKa)) - 2Cu,$$

$$-\omega^2 M_2 v = Cu(1 + \exp(iKa)) - 2Cv,$$
(4.17)

которая имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю.

$$\begin{vmatrix} 2C - \omega^2 M_1 & -C(1 + \exp(-iKa)) \\ -C(1 + \exp(iKa)) & 2C - \omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0,$$
(4.18)

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos(Ka)) = 0.$$
(4.19)

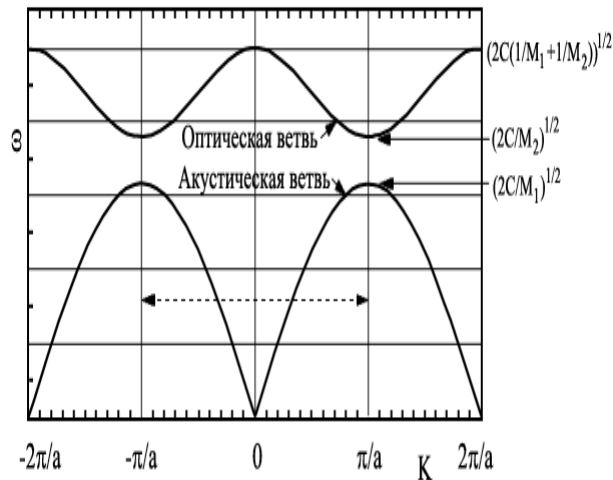


Рис. 4.5 Зависимость частоты ω от волнового вектора K для случая продольной плоской

волны, распространяющейся вдоль направления $[100]$ в кубической решетке с базисом из двух атомов.

Наибольший "методический" интерес представляет решение этого уравнения в случаях:

1) малых K и 2) вблизи значения $K = \pm\pi/a$.

В случае малых K значение $\cos(Ka) \approx 1 - (1/2)K^2a^2$.

$$\omega^2 \approx 2C / (1/M_1 + 1/M_2); \quad \omega^2 \approx CK^2a^2 / 2(M_1 + M_2). \quad (4.20)$$

Первый корень соответствует *оптической ветви дисперсионной зависимости фонона $\omega(K)$* , а второй корень соответствует *акустической ветви дисперсионной зависимости фонона $\omega(K)$* .

Для оптической ветви следует, что атомы колеблются приблизительно в противофазе, а именно при $K \approx 0$ выполняется соотношение: $u/v = -M_1/M_2$. Такой вид колебаний можно возбуждать переменным электрическим полем электромагнитной волны в случае разных зарядов атомов 1 и 2; отсюда и появилось название "*оптический фонон*". Заметим что действием магнитного поля в рассмотренном случае пренебрегают, поскольку магнитное поле волны при малых скоростях движения, согласно законам электродинамики, значительно слабее воздействует на заряды.

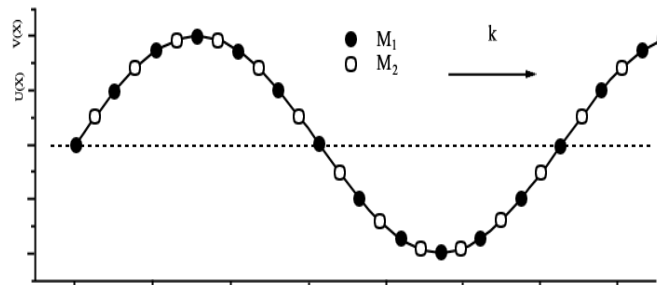


Рис. 4.6 Отклонения атомов в случае акустического (а) и оптического (б) типов поперечных колебаний атомов

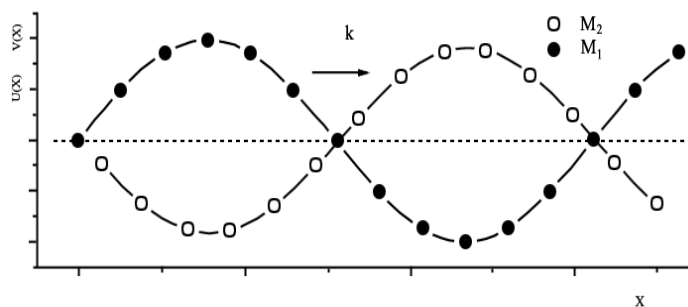


Рис. 4.7 Отклонения атомов в случае акустического (а) и оптического (б) типов поперечных колебаний атомов

Для акустической ветви следует, что атомы колеблются приблизительно в одной фазе, а именно при $K \approx 0$ выполняется соотношение: $u/v = 1$. Такой вид колебаний можно возбуждать переменным упругим воздействием на кристалл. Он соответствует акустическим колебаниям атомов в длинноволновом приближении сплошной среды, когда атомы движутся согласованно приблизительно в одной фазе; отсюда и появилось название "*акустический фонон*".

4.5 Колебания атомов трехмерной решетки.

Колебания атомов в многоатомной решетке - можно рассмотреть по той же схеме, что и двухатомной. В результате в случаях, аналогичных рассмотренным выше, для ячейки,

содержащей r атомов, получаются r корней уравнения как для продольной, так и для поперечной волны; часть из них принято считать отвечающим акустической ветви, а другую часть - оптической ветви зависимости $\omega(K)$. Всего получаются три акустические ветви и $3r - 3$ оптические ветви зависимости $\omega(K)$, а в сумме - $3r$ ветвей фононного спектра.

4.6 Теплоемкость твердых тел. Закон Дюлонга-Пти. Теория теплоемкости Эйнштейна. Теория теплоемкости Дебая. Фононы. Теплоемкость твердых тел. Теплоемкость металлов. Распределение Ферми-Дирака. Вклад свободных электронов в теплоемкость твердых тел.

Атомы в твердом теле при любой температуре совершают тепловые колебания около своих средних положений равновесия. При нагревании твердого тела, поглощаемая им теплота расходуется на увеличение интенсивности теплового движения. Основные особенности теплового движения в твердых телах отслеживают по поведению теплоемкости с изменением температуры. Теплоемкость C_v твердого тела при постоянном объеме выражает изменение тепловой энергии при изменении температуры тела на 1°C и находится дифференцированием $E_{\text{реш}}$ по T : $C_v = dE_{\text{реш}}/dT$. Тепловая энергия $E_{\text{реш}}$ складывается из энергии нормальных колебаний решетки. Умножая число нормальных колебаний, приходящихся на спектральный участок $d\omega$, равное $g(\omega)d\omega$, на среднюю энергию

нормального колебания $\bar{E}_{\text{н.к.}} = \frac{\hbar\omega}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1 \right)}$, получим энергию нормальных колебаний,

заключенных в интервале $d\omega$: $dE_{\text{реш}} = \bar{E}_{\text{н.к.}} g(\omega)d\omega$. Проинтегрировав это выражение по всему спектру нормальных колебаний, т.е. в пределах от 0 до ω_D , получим энергию тепловых колебаний решетки твердого тела:

$$E_{\text{реш}} = \int_0^{\omega_D} \bar{E}_{\text{н.к.}} g(\omega) d\omega. \quad (4.21)$$

Основным вопросом теории теплоемкости является зависимость C_v от температуры. Рассмотрим вопрос о зависимости C_v от температуры для двух областей температур: область низких температур $T \ll \theta_D$ (θ_D - температура Дебая) и область высоких температур $T > \theta_D$.

1. Область высоких температур.

В области высоких температур изменение энергии твердого тела может происходить только за счет повышения степени возбуждения нормальных колебаний, приводящего к увеличению их средней энергии. Полная средняя тепловая энергия системы, состоящей из N_A атомов с $3N_A$ степенями свободы равна $E = 3N_A k_B T$. Отсюда молярная теплоемкость

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = 3N_A k_B = 3R. \quad (4.22)$$

Здесь $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ - постоянная Авогадро; $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К - постоянная Больцмана; $R = 8,31$ Дж/моль К - молярная газовая постоянная. Это закон Дюлонга и Пти, достаточно хорошо оправдывающийся на практике.

2. Область низких температур.

В области низких температур энергия кристалла с повышением температуры увеличивается вследствие действия двух механизмов:

- 1) роста средней энергии каждого нормального колебания из-за повышения степени его возбуждения;
- 2) роста числа возбужденных нормальных колебаний решетки.

Первый механизм вызывает рост энергии, пропорциональный T , второй - пропорциональный - T^3 . Поэтому в целом с повышением температуры энергия решетки растет пропорционально T^4 : $E_{\text{реш}} \sim T^4$, а теплоемкость пропорционально T^3 (закон Дебая).

Физическая картина характера изменения температурной зависимости энергии и теплоемкости твердого тела при повышении его температуры выглядит таким образом. В области низких температур ($T \ll \theta_D$) энергия тела с увеличением температуры повышается, во-первых, вследствие роста степени возбуждения каждого нормального колебания, т.е. роста их средней энергии, пропорциональной T ; во-вторых, вследствие включения в работу все новых и новых нормальных колебаний, вызывающих повышение энергии тела пропорционально T^3 . По мере приближения к температуре Дебая второй механизм постепенно из работы выключается, и зависимость E от T ослабляется, что вызывает отступление от закона Дебая.

При температуре Дебая возбуждается уже весь спектр нормальных колебаний решетки, поэтому второй механизм роста энергии с повышением температуры выключается полностью; работает лишь первый механизм, вызывая рост энергии, пропорциональный T , и независимость от T теплоемкости тела C_v (закон Дюлонга и Пти).

Более строгие количественные расчеты, подкрепляющие качественные закономерности изменения $C_v(T)$, были выполнены в 1907г. Эйнштейном, а затем Дебаем (в 1912 г.).

1. Модель Эйнштейна.

Эйнштейн исходил из двух предположений:

- твердое тело представляет собой совокупность одинаковых гармонических осцилляторов (атомов), которые колеблются независимо друг от друга с одной и той же частотой ω в трех взаимно перпендикулярных направлениях;
- энергия осцилляторов квантована по Планку.

Энергия E системы из N_A атомов, определяемая колебаниями решетки равна

$$E = \frac{3N_A \hbar \omega}{e^{\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)} - 1}. \quad (4.23)$$

Тогда теплоемкость

$$C_v = \frac{3N_A k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)^2}{\left(e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1\right)^2} e^{\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)}. \quad (4.24)$$

В области высоких температур формула приобретает вид закона Дюлонга и Пти. В области низких температур $C_v \sim e^{-\frac{\hbar \omega}{k_B T}}$. Ограниченность модели Эйнштейна состоит в его предположении о равенстве частот всех упругих волн в твердом теле.

2. Модель Дебая.

Дебай сохранил идею Эйнштейна о квантованности энергии гармонических осцилляторов по Планку, дополнив ее предположением о том, что гармонические осцилляторы колеблются с различными частотами. Энергия системы осцилляторов с различными частотами равна

$$E = \frac{9Nk_B T}{(\theta_D / T)^3} \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (4.25)$$

где $x = \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)$; $\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$. Тогда при высоких температурах теплоемкость: $C_v = 3R$, а при низких:

$$C_v = \frac{12\pi^4 N k_B}{5\theta_D^3} T^3.$$

Теплоемкость металлов складывается из теплоемкости решетки $C_{\text{реш}}$ и теплоемкости электронного газа C_e

$$C_v = C_{\text{реш}} + C_e. \quad (4.26)$$

С классической точки зрения (электронный газ невырожденный)

$$E_e^{\text{кл.}} = N_A \frac{3}{2} k_B T = \frac{3}{2} RT.$$

Поэтому теплоемкость электронного газа $C_e^{\text{кл.}} = 3R/2$, а общая теплоемкость $C_v = 9R/2$. В действительности в области высоких температур металлы, как и диэлектрики, обладают теплоемкостью $C_v = 3R$, что свидетельствует о том, что электронный газ не вносит заметного вклада в теплоемкость металлов. Это обстоятельство нашло объяснение в квантовой теории. Вследствие того, что электронный газ в металлах является вырожденным, термическому возбуждению даже в области высоких температур подвергается лишь незначительная доля свободных электронов ($\leq 10\%$); остальные электроны теплоту не поглощают. Поэтому теплоемкость такого газа незначительна по сравнению с теплоемкостью решетки и теплоемкость металла в целом практически равна теплоемкости его решетки. В области низких температур теплоемкость решетки падает $\sim T^3$ и вблизи абсолютного нуля может оказаться столь малой, что основное значение может приобрести теплоемкость электронного газа C_e , которая с понижением температуры падает значительно медленнее ($C_e \sim T$).

4.7 Тепловое расширение твердых тел. Ангармонизм.

С нагреванием твердого тела средние расстояния между частицами увеличиваются, и тело расширяется. Причиной этого является ангармонический характер колебаний частиц твердого тела, обусловленный асимметрией кривой зависимости энергии взаимодействия частиц от расстояния между ними. Коэффициент линейного теплового расширения α равен

$$\alpha = \frac{1}{x_0} \frac{d\langle x \rangle}{dT} = \frac{3k_B g}{x_0 \beta^2}, \quad (4.27)$$

где $\langle x \rangle$ - среднее расстояние между атомами; x_0 - положение равновесия атомов, g - коэффициент ангармоничности, β - коэффициент квазиупругой силы.

Еще одним эффектом, обусловленным ангармоническим характером колебания атомов, является тепловое сопротивление твердых тел. Выражение для теплопроводности в случае фононов: $K=1/3 (Cv L)$, где C - теплоемкость единицы объема, v - средняя скорость частицы, L -средняя длина свободного пробега между двумя последующими столкновениями. Теплопроводность металлов складывается в общем случае из теплопроводности, обусловленной фононами, и теплопроводности, обусловленной свободными электронами: $K=K_{\text{реш.}}+K_{\text{эл.}}$, при этом для металлов $K_{\text{эл.}}/K_{\text{реш.}}=10^2$.

4.8 Теплопроводность твердых тел. Теплопроводность, обусловленная атомными колебаниями. Теплопроводность металлов. Распределение Ферми-Дирака. Вклад свободных электронов в теплопроводность твердых тел.

Теплопроводность кристаллов. Коэффициент теплопроводности κ определяется как количество тепловой энергии ΔW переданное через единицу площади вещества за единицу времени Δt при единичном градиенте температуры dT/dx (см. рис. 3.14).

$$\Delta W = \Delta S \Delta t (dT / dx) \kappa \quad (4.28)$$

Данная формула используется и для экспериментального определения коэффициента теплопроводности веществ; при этом измеряют все входящие в нее величины для подсчета κ .

Экспериментальные данные для диэлектриков показывают, что κ увеличивается при повышении T от температуры абсолютного нуля; κ имеет при температуре 30-50 К размытый максимум и при дальнейшем увеличении температуры κ убывает. При сравнительно высоких температурах (порядка температуры Дебая) коэффициент теплопроводности убывает как $1/T$.

В рассмотренных моделях кристалл рассматривается как совокупность невзаимодействующих осцилляторов; это давало возможность пользоваться теорией Бозе-газа для описания тепловых свойств кристалла. Такое приближение оправдано, если силы, возвращающие смещенный атом в положение равновесия, линейно зависят от смещений, то есть упругие константы не зависят от смещений атомов. Обычно эти предположения, называемые гармоническим приближением, выполняются только приближенно (см. начало этого раздела). Именно благодаря отклонениям от гармонического приближения можно объяснить физические механизмы взаимодействия двух фононов, которые, согласно теории распространения упругих волн, в линейной однородной среде не должны вообще взаимодействовать друг с другом.

Возможность взаимодействия двух фононов объясняется следующим образом. Пусть через кристалл распространяется фонон, он деформирует кристаллическую решетку с периодом равным длине его волны λ . Тогда, согласно изложенным в начале этого раздела рассуждениям, в кристалле появится модуляция упругих постоянных с таким же периодом модуляции, напоминающая дифракционную решетку. Второй фонон, распространяясь через такую "дифракционную решетку", может дифрагировать на ней. В результате он изменит направление своего движения, причиной чего стал первый фонон, создавший своеобразную дифракционную решетку. В таком случае говорят о взаимодействии, столкновении двух фононов. Необходимым условием такого столкновения является "нелинейный эффект" - искажение упругих свойств кристаллической решетки при прохождении через нее фонона. Поэтому и принято считать процессы столкновения фононов проявлением "ангармонических, нелинейных" свойств взаимодействий в кристалле.

Рассмотрение фононов как редко взаимодействующих частиц почти идеального Бозе-газа позволяет при расчете коэффициента теплопроводности использовать формулу, полученную для идеального газа:

$$\kappa = C_V \langle v \rangle l_{\text{eff}} \quad (4.29)$$

В этой формуле C_V - теплоемкость единицы объема газа при постоянном объеме (у нас - Бозе-газа); $\langle v \rangle$ - средняя скорость молекул газа (у нас - скорость упругих волн - групповая скорость бозонов); l_{eff} - эффективная длина свободного пробега молекул газа (у нас - бозонов).

Величина l_{eff} зависит от частоты столкновений "переносчиков" теплоты и, что самое главное, от того, насколько данный вид столкновений изменяет картину переноса энергии "переносчиками" теплоты. Очевидно, что столкновения, приводящие к отклонению частиц, переносящих энергию, на малый угол слабее влияют на перенос теплоты и величину l_{eff} , чем процессы, приводящие к сильной переориентации направления движения частицы.

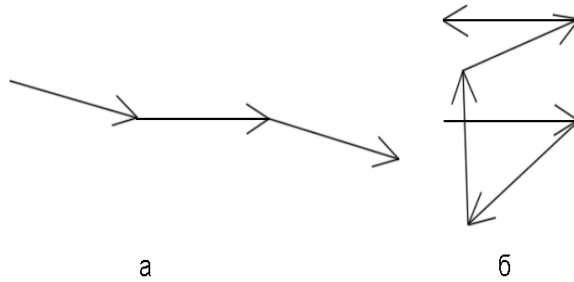


Рис. 4.8. Схема движения частицы, испытывающей при столкновениях отклонения на малые (а) и большие (б) углы

Столкновения фононов вида $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3$ и $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3 + \vec{k}_4$, при которых выполняется закон сохранения энергии и импульса фононов, также оказывают малое влияние на уменьшение величины κ . Их принято называть *нормальными процессами* (или *N-процессами*).

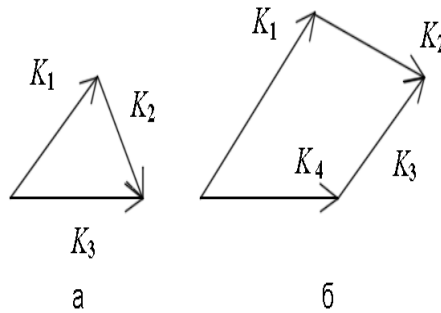


Рис. 4.9 Схемы столкновения фононов вида $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3$ (а) и $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3 + \vec{k}_4$ (б), при которых выполняется закон сохранения импульса фононов

Это название связано с тем, что суммарный импульс фононов $\vec{k}_1 + \vec{k}_2$ при таких процессах сохраняется; как следствие сохраняется направление движения столкнувшегося коллектива фононов как целого и связанное с ним направление переноса связанной с ними тепловой энергии.

В кристалле возможны столкновения фононов вида $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3 + \vec{G}$, где \vec{G} (вектор обратной решетки, для которых закон сохранения импульса в обычной записи (без учета вектора \vec{G}) не выполняется).

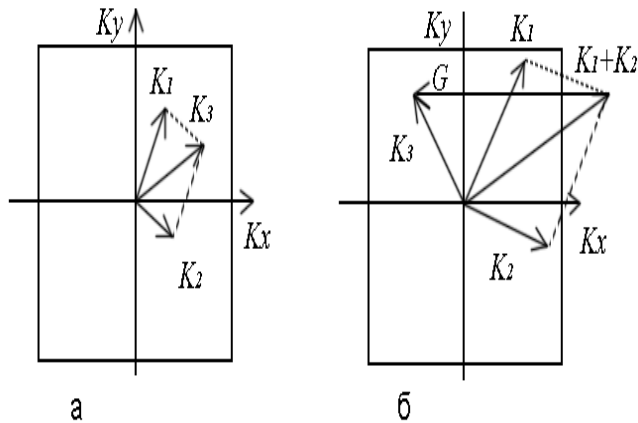


Рис. 4.10 Схема процесса переброса

При таких столкновениях суммарный импульс фононов $\vec{k}_1 + \vec{k}_2$ оказывается за границей первой зоны Бриллюэна, и к импульсу системы фононов добавляется импульс \vec{G} , полученный от кристаллической решетки. В результате вектор родившегося фонона \vec{k} имеет направление распространения, сильно отличающееся от направления суммарного импульса фононов $\vec{k}_1 + \vec{k}_2$. Именно такие процессы, при которых в ходе одного столкновения происходит сильное изменение направления движения системы фононов и связанное с ним направление переноса тепловой энергии, оказывают очень сильное влияние на теплопроводность. Их принято называть *процессами переброса* (или *U-процессами*).

Заметим, что для появления процесса переброса значения $|\vec{k}_1|$ и $|\vec{k}_2|$ должны быть достаточно большими порядка $|\vec{G}/4|$ и более. Такие процессы происходят при сравнительно высоких температурах, когда велика вероятность встретить фонон с большими значениями волнового вектора и энергии.

Оценим температурную зависимость коэффициента теплопроводности при высоких температурах. В этом случае C_V примерно постоянна, число фононов с $|\vec{k}| > |\vec{G}/4|$ достаточно велико. Тогда длина свободного пробега окажется обратно пропорциональной вероятности столкновения с упомянутыми фононами. В итоге получается, что при высоких температурах $\kappa(T) = \text{const} / T$, что и наблюдается экспериментально.

Оценим температурную зависимость коэффициента теплопроводности (при низких температурах). В этом случае C_V пропорциональна T^3 , число фононов с $|\vec{k}| > |\vec{G}/4|$ очень мало, пропорционально $\exp(-|\vec{G}|\hbar v / 4kT)$ и при $T \rightarrow 0$ стремится к нулю. Тогда $l_{\vec{v}}$ должна была бы стремиться к бесконечности, но этого не происходит, поскольку начинает сказываться рассеяние фононов на структурных неоднородностях (дефектах, границах зерен и т.п.). Тогда $l_{\vec{v}}$ определится в основном концентрацией дефектов, не зависящей от температуры. В этом случае можно считать, что $l_{\vec{v}}$ не зависит от температуры, а $C_V(T)$ пропорциональна T^3 . Тогда $\kappa(T)$ пропорционален T^3 , что наблюдается экспериментально.

Таким образом удается теоретически объяснить зависимость коэффициента теплопроводности $\kappa(T)$ от температуры, изображенную на рис. 4.11. Главными ее особенностями являются наличие максимума при температурах 20-50 К и уменьшение $\kappa(T)$ как при высоких, так и при низких температурах.

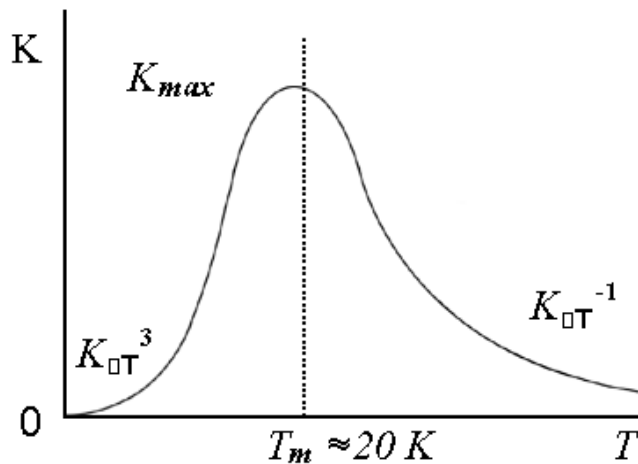


Рис. 4.11 Схематическая зависимость коэффициента теплопроводности от температуры для кристаллических диэлектриков

В данном разделе мы рассмотрели вклад фононов в процессы теплопроводности. Тепловую энергию могут переносить и свободные электроны, которых очень много в веществах, называемых проводниками. Как правило, свободные электроны обеспечивают в проводниках даже больший вклад в теплопроводность, чем фононы.

4.9 Диффузия в твердых телах.

Тепловые колебания атомов в твердых телах сводятся в основном к колебаниям с малой амплитудой, которые они совершают около средних положений равновесия. Однако кинетическая энергия атомов вследствие их взаимодействия с соседними атомами не остается постоянной. Даже в том случае, когда средняя кинетическая энергия атомов мала, согласно максвелловскому закону распределения скоростей, в кристалле всегда найдется некоторое число атомов, кинетическая энергия которых достаточно велика. Такой атом может сорваться со своего равновесного положения и, преодолев потенциальный барьер, созданный окружающими его атомами, перейти в некоторое новое свободное положение равновесия. При этом атом теряет избыточную энергию, отдавая ее атомам кристаллической решетки. Через некоторое время атом снова может набрать достаточную энергию, чтобы вырваться из нового окружения и перейти в соседнее. Такие перемещения атомов, обусловленные тепловым движением, и составляют основу диффузионных процессов в твердых телах. Диффузионное перемещение примесных атомов или собственных атомов решетки всегда связано с наличием в ней простых дефектов – вакансий, междоузельных атомов, дивакансий – и других более сложных дефектов – дислокаций, границ раздела, вакансионных и примесных кластеров (скоплений). Из-за теплового движения при любой температуре происходит непрерывное “перемешивание” атомов, составляющих твердое тело. Скорость “перемешивания” при наличии в решетке вакантных узлов, выражаемая вероятностью перехода атома из одного равновесного положения в другое, вследствие статистического характера процесса изменяется с температурой по экспоненциальному закону:

$$P_m \approx v_0 \exp\left[-\frac{E_m}{k_B T}\right], \quad (4.30)$$

где E_m - высота потенциального барьера (энергия миграции вакансии), который должен преодолеть атом, чтобы перейти из одного положения равновесия в другое; $v_0 \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$ – собственная частота колебаний атома. При данной температуре вероятность P_m определяется значением E_m , зависящим от прочности связи атомов в решетке. Вероятность перехода атома из узла в вакансию должна быть обратно пропорциональна времени “оседлой” жизни атома

$$\text{(вакансии) в узле: } \tau = \frac{1}{P_m} = \tau_0 \exp\left[\frac{E_m}{k_B T}\right], \quad (4.31)$$

где τ_0 - период собственных колебаний атома, соответствующий максимальной частоте в акустическом спектре, и по порядку величины равной 10^{-13} с. Чем выше температура тела, тем меньше время нахождения атома в узле. Средняя скорость, с которой вакансия движется по кристаллу

$$\langle v \rangle = \frac{\delta}{\tau} = \frac{\delta}{\tau_0} \exp\left[-\frac{E_m}{k_B T}\right]. \quad (4.32)$$

Концентрация вакансий зависит от температуры

$$V_1 = \frac{n}{N} = \exp\left[-\frac{E_\phi}{k_B T}\right], \quad (4.33)$$

где E_ϕ - энергия образования вакансии. Коэффициент диффузии вакансий D в кристаллах

$$D = \frac{1}{3} \langle v \rangle \langle \lambda \rangle = \frac{1}{3} \frac{\langle \lambda^2 \rangle}{\tau}, \quad (4.34)$$

где $\langle \lambda \rangle$ - средняя длина свободного пробега частицы; τ - время между двумя столкновениями. Если элементарные перемещения в твердом теле имеют одно и то же значение δ , то

$$D = \frac{\delta^2}{6\tau_0} \exp\left[-\frac{E_m}{k_B T}\right]. \quad (4.35)$$

Аналогичные рассуждения относятся и к перемещениям атомов по междоузлиям. Перемещение атома из одного междоузлия в соседнее происходит с большей скоростью, поскольку барьеры между междоузлиями понижены по сравнению с барьерами между атомами, сидящими в узлах, и всегда рядом с диффундирующим атомом имеется готовое незанятое междоузлие.

Полная вероятность P того, что одновременно рядом с атомом окажется вакансия и атом совершит перескок в эту вакансию, равна произведению вероятностей:

$$P = P_m P_\phi = \frac{1}{\tau_0} \exp\left[-\frac{E_m}{k_B T}\right] \exp\left[-\frac{E_\phi}{k_B T}\right] = \frac{1}{\tau_0} \exp\left[-\frac{Q}{k_B T}\right], \quad (4.36)$$

где $Q = E_m + E_\phi$ - энергия активации процесса самодиффузии.

Коэффициент диффузии атома по вакансиям

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{Q}{k_B T}\right], \quad (4.37)$$

где предэкспоненциальный множитель $D_0 = \delta^2/(6\tau_0)$. В реальной ситуации процессы диффузии протекают много сложнее и одновременно могут действовать не один, а сразу несколько механизмов. А.Фик для качественного метода расчета диффузии использовал уравнение теплопроводности, выведенное Фурье. Он исходил из гипотезы, что в изотропной

среде количество \vec{J} диффундирующего вещества, проходящее за единичное время через единичную площадь поперечного сечения, пропорционально градиенту концентрации C , измеряемому по нормали к этому сечению:

$$\vec{J} = -D \text{grad} C = -D \nabla C. \quad (4.38)$$

Это первый закон Фика для стационарного потока. Здесь J - плотность тока диффундирующих атомов; C - их концентрация; ∇ - оператор градиента. В общем случае, диффузия анизотропна и коэффициент диффузии D - тензор второго ранга

$$D = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{pmatrix}. \quad (4.39)$$

Для одномерной диффузии и изотропной среды уравнение Фика имеет вид $J_x = -D \frac{\partial C}{\partial x}$. Так

как C характеризует количество вещества в единичном объеме, то коэффициент диффузии имеет размерность $\text{см}^2/\text{с}$ или $\text{м}^2/\text{с}$. Для нестационарного потока второй закон Фика получаем исходя из следующих соображений. Скорость накопления диффундирующего вещества в данном элементе объема является разностью между входящими и выходящими потоками за единичное время. Рассмотрим две параллельные плоскости, площадь каждой из которых равна единице, а расстояние между ними составляет dx . Поток через первую плоскость равен: $J = -D \frac{\partial C}{\partial x}$, а поток через вторую плоскость: $J + \frac{\partial J}{\partial x} = -D \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$. Тогда

разность потоков: $\frac{\partial J}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$. Но $\frac{\partial J}{\partial x}$ равно взятой с обратным знаком скорости

изменения концентрации, т.е. $-\frac{\partial C}{\partial t}$. Таким образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (4.40)$$

При условии, что коэффициент диффузии не зависит от концентрации, т.е. является величиной постоянной, получен второй закон Фика для одномерной диффузии в дифференциальной форме

$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$, где $C = C(x,t)$ – зависит от времени t и глубины диффузии x . Для диффузии в трех измерениях в изотропной среде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \quad (4.41)$$

Основным источником информации о параметрах диффузии в твердых телах является эксперимент. В практике экспериментального исследования процессов диффузии примесей в твердых телах используют решения уравнения второго закона Фика для одномерного случая при определенных для конкретной физической задачи начальных и граничных условиях.

Модуль 5 «Электронные свойства конденсированных сред»

5.1 Электрические свойства конденсированных сред.

Кристаллические твердые тела сильно различаются электрическими свойствами, например, металлы очень хорошо проводят электрический ток, их принято считать проводниками, а некоторые кристаллы ток практически не проводят, их принято считать изоляторами. Между этими группами твердых тел есть и вещества, называемые полупроводниками, с промежуточными значениями электропроводности. Такие сильные различия в электропроводности связаны с особенностями распределения электронов по энергетическим уровням формирующих кристалл атомов.

Подходы к вычислению электронных состояний в твердых телах. Каждый электрон в кристалле движется в сложном поле, создаваемом ядрами и движущимися электронами. Решить в таком случае уравнение Шредингера для электрона в кристалле и найти тем самым систему энергетических состояний электрона очень сложно и в настоящее время не удается. Поэтому для решения этой задачи используют различные упрощающие приближения.

Во-первых, рассматривают движение только внешних электронов в потенциале ионных остовов, содержащих ядро атома и электроны внутренних подболочек. В таком случае необходимо также решить уравнение Шредингера для электрона, но в более слабом потенциале ионных остовов, что значительно легче. Однако с помощью и этого подхода к настоящему времени удалось решить только очень упрощенные задачи такого движения

электрона, в основном не трех, а одномерные. Ниже рассмотрены результаты решения одной из них (модель Кронига-Пенни) об одномерном движении электрона в периодическом потенциале.

Во-вторых, рассматривают два наиболее распространенных частных случая: 1) *приближение сильной связи* и 2) *приближение почти свободных электронов*.

В рамках приближения сильной связи считают, что энергия взаимодействия электрона со своим атомом много больше, чем энергия взаимодействия с другими атомами. Иными словами, электроны сильно связаны со своим атомом, на который другие атомы оказывают малое влияние своими электромагнитными полями, лишь расщепляя их энергетические уровни.

Модель Кронига-Пенни. В модели Кронига-Пенни рассматривается одномерное движение электрона в периодическом потенциале простой формы: в одномерной потенциальной яме ширины L на одинаковом расстоянии a друг от друга располагаются потенциальные прямоугольные барьеры; высота каждого из них V , а ширина b (см. рис. 5.1). Ясно, что такая форма потенциальных барьеров далека от реального потенциала ионных остовов, схематически изображенной на рис. 5.1 сплошными тонкими кривыми. Однако, даже такая грубая модель в состоянии предсказать основные закономерности энергетического спектра движущихся в кристалле электронов.

Уравнение Шредингера для электрона, находящегося в такой потенциальной яме, может быть решено приближенными методами [1,2]. В результате получается, что энергия E электрона может принимать не все значения, а именно, на шкале E имеются участки с разрешенными значениями энергии и участки запрещенных значений энергии (см. рис. 5.1). Промежуток на шкале E , в котором нет разрешенных значений E , называют *запрещенной энергетической зоной* (или запрещенной энергетической полосой), а промежуток, в котором имеются разрешенные значения E , называют *разрешенной энергетической зоной* (или разрешенной энергетической полосой).

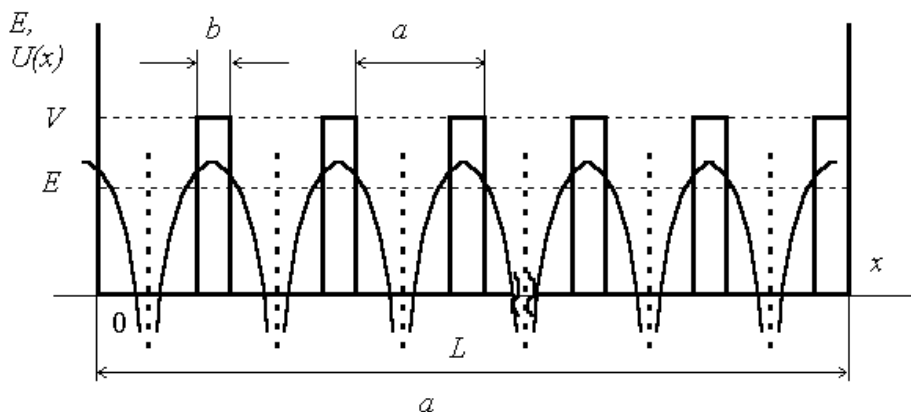


Рис. 5.1. Вид потенциальной энергии в рамках модели Кронига-Пенни (а) и схематическое распределение разрешенных значений энергии E по шкале энергии (б).

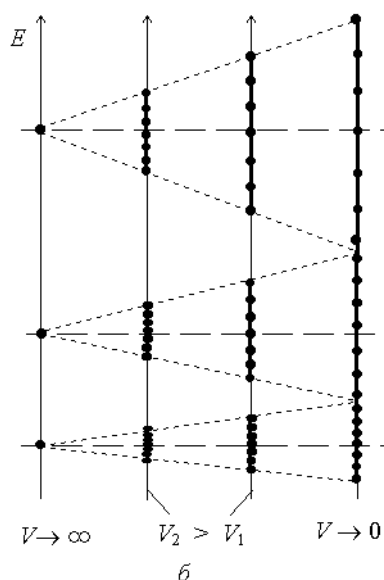


Рис. 5.2 Вид потенциальной энергии в рамках модели Кронига-Пенни (а) и схематическое распределение разрешенных значений энергии E по шкале энергии (б).

Интересно проследить, как меняется распределение электронов по уровням при увеличении высоты и ширины потенциальных барьеров на рис. 5.1 (а).

При отсутствии барьеров задача аналогична задаче о движении электрона в одномерной потенциальной яме шириной L с периодическими граничными условиями для волновой функции Ψ . Эта задача была рассмотрена в теме 5. Распределение значений энергии электрона по шкале показано на рис. 5.1 (б). Разрешенные значения энергии распределены по шкале без больших "пробелов".

Если барьеры настолько высокие и широкие, что туннелированием электрона сквозь них можно пренебречь, то задача аналогична задаче о движении электрона в одномерной потенциальной яме шириной $a - b$. Электрон окажется локализованным в этой маленькой потенциальной яме (как бы у "своего" атома). Эта задача была рассмотрена в теме 5. Распределение значений энергии электрона по шкале E показано на рис. 5.1 (б); разрешенные значения - изолированы друг от друга.

При промежуточных значениях высот и ширин барьеров на рис. 5.1 (а) значения E вычисляются приближенными методами. Разрешенные значения распределены в таких случаях как на рис. 5.1 (б). На этом же рисунке показано, как при увеличении высот барьеров изменяются положения границ разрешенных и запрещенных энергетических зон, а именно запрещенные зоны расширяются за счет разрешенных. В пределе при почти полной непроницаемости потенциальных барьеров разрешенная зона сужается почти до одиночного уровня. Такая ситуация характерна для изолированных атомов, в таком случае электрон локализован вблизи своего атома; это соответствует приближению сильной связи.

Приближение сильной связи. Это приближение, называемое приближением сильной связи, базируется на предположении, что энергия связи электрона в данном атоме больше энергии взаимодействия этого электрона с полями, создаваемыми другими атомами. В таком случае электронные состояния в конденсированном веществе (кристаллах и жидкостях) должны иметь сходство с электронными состояниями изолированных атомов, поскольку взаимодействие атомов друг с другом не сможет радикально изменить систему электронных состояний атома.

Приближение сильной связи хорошо описывает систему энергетических уровней электронов в случае атомов, хорошо удерживающих свои электроны, например в ионных и ковалентных кристаллах. Примерный вид системы уровней можно предсказать, вспомнив,

что атомы воздействуют друг на друга создаваемыми ими электрическими и магнитными полями и что эти поля приводят к расщеплению отдельного вырожденного уровня атома на несколько подуровней. В таком случае вместо одиночных уровней изолированных атомов в конденсированном веществе должен получиться большой набор уровней в некотором диапазоне энергий. Такой набор принято называть *энергетической полосой* или разрешенной энергетической зоной.

Рассмотрим сначала N атомов, расположенных далеко друг от друга. Тогда взаимодействием атомов можно пренебречь и считать, что каждый из них имеет определенные значения энергии уровней, одинаковые для каждого из атомов. Уровни всей системы N атомов окажутся $2N$ кратно вырожденными (2 появляется из-за учета спина). При сближении атомов энергия уровней будет уменьшаться за счет уменьшения энергии атомов из-за их взаимного притяжения. Кроме того, уровни будут расщепляться и тем сильнее, чем ближе находятся атомы, поскольку создаваемые ими поля возрастают при приближении к атому. При расстоянии между атомами порядка периода кристаллической решетки должен наблюдаться минимум энергии уровней, поскольку при дальнейшем сближении атомы отталкиваются, и энергия их взаимодействия сильно возрастает. В таком случае зависимость энергии уровней атомов в зависимости от расстояния между ними будет иметь вид схематически изображенный на рис. 5.2. Очевидно, что наибольшему расщеплению подвергнутся уровни, соответствующие внешним валентным электронам.

Модель почти свободных электронов. Существует большая группа кристаллических веществ, например металлических, в которых внешние электроны атомов "обобществляются" и могут относительно свободно перемещаться по кристаллу. В этом случае очень удачной оказывается модель почти свободных электронов, в рамках которой считают, что электроны в кристалле движутся внутри потенциальной ямы размером с кристалл в слабом поле периодически расположенных ионных остовов, которое можно рассматривать как малое возмущение.

В качестве первого приближения для описания поведения электронов в кристалле полем ионных остовов пренебрегают и используют модель электронного Ферми-газа. В виду особой важности этой модели рассмотрим вкратце основные выводы этой теории, называемой еще *приближением свободных электронов*.

Систему электронных состояний в пространстве волновых векторов электронов получают в результате решения уравнения Шредингера для трехмерного потенциального ящика кубической формы с ребром длины L . В случае периодических граничных условий для волновой функции Ψ система электронных состояний имеет допустимые значения волнового вектора

$$k_x = 2\pi n_1 / L; \quad k_y = 2\pi n_2 / L; \quad k_z = 2\pi n_3 / L; \quad (5.1)$$

где $n_1; n_2; n_3$ - целые числа. Заметим, что шаг изменения величин k_x, k_y, k_z оказывается достаточно мелким из-за большой величины L . Поэтому функции зависящие от $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ далее рассматриваются как непрерывные функции \vec{k} .

Волновые функции электронов имеют вид:

$$\Psi = A \exp(i\vec{k} \vec{r}), \quad (5.2)$$

где $A = (2\pi / L)^{3/2}$

Кинетическая энергия электронов (их потенциальная энергия равна нулю) вычисляется по формуле:

$$E = p^2 / 2m = (\hbar k)^2 / 2m = (\hbar^2 / 2m)(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (5.3)$$

При температуре $T = 0$ К все N электронов стремятся занять состояния с самыми малыми значениями E , соблюдая принцип Паули (не более 1 электрона на одно состояние). В таком случае в k -пространстве занятые состояния окажутся внутри шара радиуса k_F . Поверхность этого шара называется *поверхностью Ферми*, а отвечающая ей энергия электронов - *энергией Ферми*. Энергия Ферми зависит от концентрации свободных электронов n и вычисляется по формуле:

$$E_F = (\hbar^2 / 2m)(3\pi^2 n)^{2/3} \quad (5.4)$$

При увеличении температуры вероятность заполнения состояний электронами задается функцией занятости состояний, имеющей вид:

$$f(E) = 1 / \{ \exp((E - E_F) / kT) + 1 \} \quad (5.5)$$

График этой функции при различных температурах приведен на рис. 5.3.

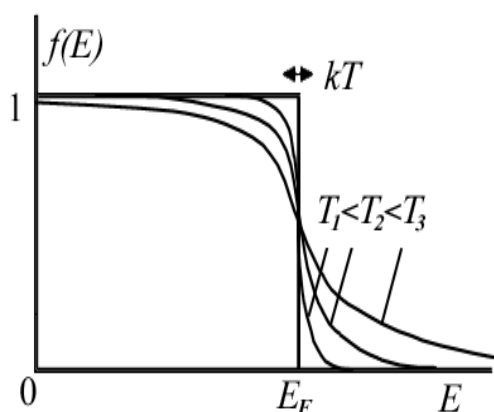


Рис. 5.3. Функция заполнения состояний электронами Ферми-газа при различных температурах.

Следует отметить, что для всех металлов при всех температурах, включая температуру их плавления, энергия Ферми в 50-200 раз превосходит величину kT . Поэтому электронный газ в металлах рассматривают как сильно вырожденный электронный Ферми-газ. Энергия Ферми при увеличении температуры незначительно увеличивается и задается формулой:

$$E_F(T) = E_F(0) \{ 1 - (\pi^2 / 12)(kT / E_F(0))^2 \} \quad (5.6)$$

Таким образом, увеличение температуры ведет к незначительному размытию поверхности Ферми в k -пространстве.

Потенциал ионных остовов в модели почти свободных электронов рассматривается как периодическая функция с периодами, соответствующими параметрам кристаллической решетки, для нее выполняется соотношение:

$$U(x + an_1, y + bn_2, z + cn_3) = U(x, y, z) \quad (5.7)$$

Принято считать, что потенциал ионных остовов имеет большую величину только в очень малой области вблизи центра ионов из-за эффекта экранирования заряда ядра электронами ионного остова. Поэтому потенциал ионных остовов рассматривают как малое возмущение.

Существует теорема Блоха, согласно которой вид волновой функции при появлении периодического поля с потенциальной энергией изменяется в соответствии с формулой:

$$\Psi = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (5.8)$$

где $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ периодическая функция, зависящая от \vec{k} и \vec{r} и имеющая те же периоды, что и потенциальная энергия ионных остовов $U(\vec{r})$. В приближении почти свободных электронов считают, что почти во всем пространстве внутри кристалла $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ близка к единице, и только в малых областях "внутри" ионных остовов она заметно отличается от единицы.

Учет периодического поля ионных остовов в модели почти свободных электронов приводит к изменению зависимости энергии электрона от волнового вектора, в частности от его направления в кристалле. Из-за этого *поверхность Ферми* перестанет быть сферической и приобретет более сложную форму, однако она останется центрально симметричной, так как в кристалле для зависимости энергии электрона от \vec{k} выполняется соотношение: $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$.

Покажем, что наиболее значимые особенности функции $E(\vec{k})$ наблюдаются вблизи границы зоны Бриллюэна. Для наглядности рассмотрим простую кубическую кристаллическую решетку с периодом a . Пусть электрон движется по направлению $[100]$ и имеет волновой вектор $\vec{k} = (k; 0; 0)$.

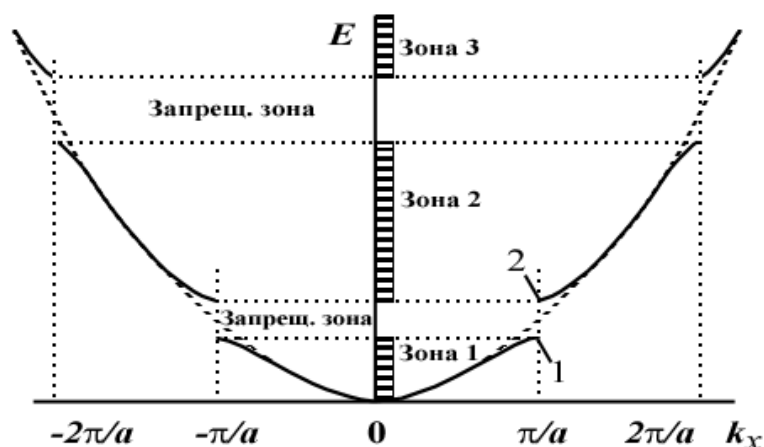


Рис. 5.4 Схема распространения электронных волн в кубической кристаллической решетке с периодом a и образования стоячей волны в этой решетке (а). Зависимость энергии электрона от его волнового вектора в модели свободных электронов и в модели почти свободных электронов (б)

Электрон, как известно, обладает волновыми свойствами, в частности имеет длину волны де-Бройля равную $\lambda_B = 2\pi\hbar / P = 2\pi / k$. При $\lambda_B = 2a$ или, что то же самое $k = \pi / a$, выполняется условие интерференционного усиления волн, рассеянных на ионах в направлении противоположном оси Ox . В самом деле, оптическая разность хода волн, рассеянных соседними атомами, равна $2a$, при $k = \pi / a$ на ней в точности уложится целое число длин волн де-Бройля электрона. Тогда появится интенсивная отраженная волна, которая будет интерферировать с волной падающей, что приведет к образованию стоячей волны.

Стоячая волна может иметь пучности либо "на узлах" кубической решетки, либо в точности "посередине" между ними. Заметим, что пучности не могут располагаться в других точках, так как в таком случае нарушилась бы симметричность расположения пучностей

электронного облака относительно кристаллической решетки (это недопустимо, так как тогда неизбежно нарушается изначально предполагавшаяся симметричность кристалла в целом).

Таким образом, согласно как модели сильной связи, так и модели почти свободных электронов, на шкале энергий электронов имеются участки разрешенных и запрещенных значений энергии - так называемые разрешенные и запрещенные зоны, причем число состояний в каждой разрешенной зоне кратно удвоенному числу атомов кристалла. В пространстве волновых векторов разрешенным значениям \vec{k} отвечают точки, заполняющие, это пространство как кубические кирпичики с ребром $2\pi/L$. Эти точки при больших размерах кристалла располагаются очень густо, поэтому при рассмотрении электронных состояний такой дискретностью пренебрегают: поверхность Ферми, в частности, рассматривают как гладкую поверхность, функцию плотности состояний считают гладкой, а не ступенчатой и т. д.

Динамика электронов в кристаллической решетке. Важнейшим и неожиданным результатом квантовой теории является вывод, что учет периодического потенциала кристаллической решетки не меняет радикально картину движения электрона по сравнению его движением в свободном пространстве. Покажем это.

Отметим, что при рассмотрении движения электронов в кристалле следует учитывать соотношение неопределенности, согласно которому:

$$\delta x \delta p_x \geq \hbar / 2 \quad (5.9)$$

В таком случае можно говорить о нахождении электрона в некоторой области пространства размера порядка δx , движущемуся со скоростью, имеющей значение в диапазоне порядка $\hbar / 2m\delta x$. Связанный с импульсом волновой вектор электрона должен тогда также иметь некоторую неопределенность $\delta k \approx 1 / (2\delta x)$. Поскольку волновой функцией свободного электрона является плоская волна вида:

$$\Psi = A \exp(ikr), \quad (5.10)$$

то электрону, имеющему значения δk в некотором диапазоне, согласно теории волн, будет соответствовать волновой пакет. Скорость распространения максимума амплитуды волнового пакета, так называемая групповая скорость, определяется как:

$$v_g = (\partial \omega / \partial k) = (\partial E / \partial p) = (1 / \hbar) (\partial E / \partial k) \quad (5.11)$$

Эта скорость и характеризует процесс перемещения волнового пакета и связанной с ним области пространства, где вероятность встретить электрон будет наибольшей. На границе зоны Бриллюэна, где происходит образование стоячей волны и нет переноса энергии волной, групповая скорость равна нулю и график $E(k)$ в точке $k = \pi/a$ должен иметь горизонтальную касательную. В таком случае функция $E(k)$ должна иметь хотя бы одну точку перегиба.

Понятие групповой скорости обобщается и на трехмерное распределение состояний: в трехмерном \vec{k} -пространстве вектор групповой скорости задается как градиент функции $E(\vec{k}) / \hbar$. Он перпендикулярен поверхности Ферми.

Рассмотрим движение электрона как классической частицы под действием внешней силы \vec{F} . Вычислим, как будет изменяться \vec{v}_g . Для этого вычислим производную \vec{v}_g по времени (аналог ускорения в классической механике) для простого случая, когда как вектор

силы \vec{F} , так и групповой скорости \vec{v}_g направлен вдоль одной прямой. Тогда для проекций \vec{F} и \vec{v}_g на эту ось получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_g}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left((1/\hbar) \frac{\partial E}{\partial k} \right) = (1/\hbar) \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \frac{\partial k}{\partial t} = \\ &= (1/\hbar^2) \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \frac{\partial p}{\partial t} = (1/\hbar^2) \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) F \end{aligned} \quad (5.12)$$

Эту формулу можно переписать в виде:

$$\frac{\partial v_g}{\partial t} m_* = F \quad (5.13)$$

Она аналогична второму закону Ньютона:

$$\frac{\partial v}{\partial t} m_* = F \quad (5.14)$$

если положить что:

$$m_* = \hbar^2 / \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \quad (5.15)$$

Величину m_* принято называть *эффективной массой электрона*. В ее значении косвенно учтено воздействие периодического поля кристалла, на закон изменения энергии электрона от волнового вектора электрона. Получился неожиданный результат, что кристаллическое периодическое поле не меняет радикально картину движения электрона по сравнению с вакуумом, а изменяет лишь эффективную массу электрона.

Эффективная масса электрона значительно отличается от массы электрона и имеет, различные значения для разных волновых векторов электрона. При малых значениях модуля k , ее значение, задаваемое второй производной функции $E(k)$, оказывается положительным, а при k близких к границе зоны Бриллюэна - отрицательным. В последнем случае получается, что внешняя сила не ускоряет, а тормозит электрон. Парадокса здесь нет, поскольку торможение связано с влиянием периодического поля кристалла на движение электрона. Такие электроны ведут себя во внешних электромагнитных полях как частицы с отрицательной массой или как положительно заряженные частицы. Заметим, что такую частицу можно считать обладающей либо отрицательной массой, либо зарядом противоположного знака, что эквивалентно, поскольку ускорение частицы под действием внешнего электромагнитного поля меняет свой знак как при изменении знака массы, так и изменении знака заряда. Такие положительно заряженные частицы принято называть дырками.

Для большей части электронов эффективная масса как правило положительна. В частности, она положительна у всех электронов, если зона заполнена наполовину или менее. Отрицательной эффективной массой обладают лишь электроны в состояниях вблизи границы первой Зоны Бриллюэна.

Характер заполнения зон электронами определяет механизм проводимости вещества и объясняет деление веществ на диэлектрики полупроводники и проводники.

Прежде всего заметим, что сначала заполняются зоны с меньшей энергией, они оказываются полностью заполненными. Зона полностью заполненная, но обладающая наибольшей энергией, называется *валентной зоной*. Следующая за ней зона, называемая *зоной проводимости*, может быть не заполненной или частично заполненной. Не

заполненная зона соответствует случаю полупроводников и диэлектриков, а частично заполненная зона соответствует случаю проводников.

Если зона проводимости заполнена частично, то занятые состояния в ней будут находиться под поверхностью Ферми, которая имеет центр симметрии. В таком случае электрону с любым волновым вектором \vec{k} будет соответствовать электрон с волновым вектором $-\vec{k}$. Оба эти электрона будут обладать суммарным нулевым импульсом (и суммарной нулевой скоростью) и не будут давать вклад в перенос заряда и формирование электрического тока. Ситуация изменится, если приложить электрическое поле и связанную с ним внешнюю силу \vec{F} : состояние электрона 1 с волновым вектором \vec{k} , направленным вдоль \vec{F} , будет менее энергетически выгодным, чем состояние электрона 2 с волновым вектором $-\vec{k}$, направленным против \vec{F} . Тогда электронам будет выгодно перегруппироваться: освободить состояния А под поверхностью Ферми и занять состояния В над поверхностью Ферми. Такое распределение электронов будет уже обладать ненулевой суммарной скоростью и будет давать вклад в электрический ток. Такое вещество, называемое *проводником*, сможет хорошо проводить электрический ток, что обеспечено возможностью для электронов перераспределиться по состояниям во внешнем электрическом поле.

Случай полупроводников. Если в предыдущем случае (диэлектрика) ширина запрещенной зоны не слишком велика, а составляет, например, $10kT$, то часть электронов в результате теплового движения сможет "перебраться" из полностью заполненной зоны в зону проводимости. В таком случае в валентной зоне появятся свободные состояния (дырки), а в зоне проводимости - состояния, занятые электронами. Электроны получают возможность перегруппировки по состояниям во внешнем электрическом поле, как в зоне проводимости, так и в валентной зоне. Однако, поскольку электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне мало, такое вещество, называемое *полупроводником*, будет сравнительно плохо проводить электрический ток.

Совершенная кристаллическая решетка, не может быть препятствием для движения электронов с волновыми векторами, не попадающими на границы зон Бриллюэна. Электрон может сталкиваться лишь с другими электронами и с различными несовершенствами (дефектами) кристаллической решетки, которые принято разделять на динамические и статические.

К *динамическим дефектам* относятся, например, фононы и магноны; взаимодействие электрона с ними напоминает столкновение с движущейся частицей, отсюда и их название. На самом же деле движущийся фонон искажает кристаллическую решетку и электрон отклоняется искаженным ее участком.

К *статическим дефектам* относятся все дефекты кристаллической решетки, взаимодействие электрона с ними напоминает столкновение с покоящейся (статической) частицей, отсюда и такое название. Концентрация динамических дефектов возрастает при увеличении температуры, а статических дефектов - приблизительно остается постоянной.

Электропроводность полупроводников можно рассматривать с позиций классической механики, то есть считать, что одновременно измеримы координаты и импульс как электронов, так и дырок, и что можно отслеживать движение каждого электрона и дырки индивидуально

Беспримесные полупроводники. Рассмотрим полупроводник кремний, имеющий кристаллическую структуру типа алмаза, в которой каждый атом соединен четырьмя валентными связями с ближайшими соседями. При температуре $T=0$ К все связи заполнены электронами, что соответствует полностью заполненной валентной зоне и пустой зоне проводимости, отделенной от валентной зоны по энергии на 1,1 эВ. При увеличении температуры до примерно 200-300 К некоторые электроны из валентной зоны смогут

перейти в зону проводимости; это соответствует "уходу" электрона из ковалентной связи 1 (см. рис. 5.4) и превращению его в "свободно перемещающийся" по кристаллу электрон.

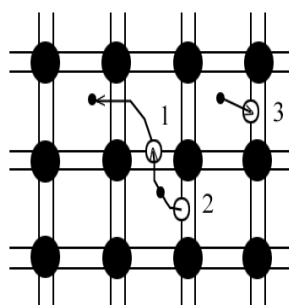


Рис. 5.5. Образование и движение электронов и дырок в полупроводниках

На месте опустевшей ковалентной связи образуется дырка - "разорвавшаяся" ковалентная связь, которую покинул электрон. Электрон из соседней связи может "перескочить" в "дырку", тогда дырка как бы переместится на новое место 2. Поскольку электроны и дырки образуются парами, то, очевидно, что число дырок в рассмотренном случае равно числу электронов.

Один из свободных электронов может занять одну из дырок; в результате они оба исчезнут, такой процесс называется *рекомбинацией электрона и дырки*. Вероятность рекомбинации пропорциональна произведению концентраций электронов и дырок. Вероятность зарождения пары электрон - дырка зависит от температуры полупроводника (а также от частоты и интенсивности излучения, падающего на полупроводник). В состоянии равновесия устанавливается равенство чисел скорости зарождения и рекомбинации электронов и дырок и связанные с ними концентрации последних, зависящие от температуры полупроводника, а также от частоты и интенсивности падающих на полупроводник излучений.

Можно получить зависимость проводимости полупроводника от температуры

$$n(T) = n_0 \exp((E_g / 2 - E) / kT) = n_0 \exp(-E_g / 2kT) \quad (5.16)$$

Поскольку проводимость пропорциональна концентрации свободных носителей заряда, аналогичную формулу можно записать и для проводимости полупроводника:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-E_g / 2kT) \quad (5.17)$$

Этот закон подтверждается экспериментально (см. рис. 5.6). Тангенс наклона прямой линии на этом рисунке связан с шириной запрещенной зоны беспримесного полупроводника.

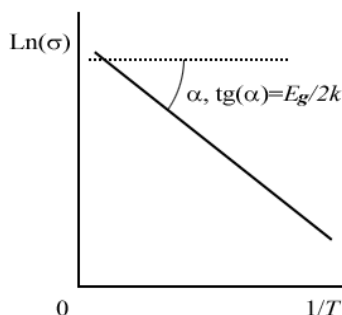


Рис. 5.6. Зависимость логарифма проводимости беспримесного полупроводника от температуры

Подвижность носителя электрического тока. Итак, ток в полупроводнике формируется свободными электронами и дырками, концентрации которых обозначим как n_e

и n_h . Тогда плотность тока в полупроводнике, помещенном в поле \vec{E} , может быть записана как:

$$\vec{j} = n_e \vec{v}_e + n_h \vec{v}_h \quad (5.18)$$

Здесь через \vec{v}_e и \vec{v}_h обозначены дрейфовые скорости электронов и дырок. Удобно ввести новую величину - *подвижность носителя электрического тока* μ с помощью соотношения:

$$\vec{v} = \mu \vec{E} \quad (5.19)$$

Из этого соотношения видно, что подвижность численно равна дрейфовой скорости движения носителя в поле \vec{E} единичной величины.

Понятие подвижности носителей - очень удобное в физике полупроводников понятие. Запись многих сложных соотношений теории полупроводников с помощью понятия подвижность сильно упрощаются. В частности соотношение (5.18) можно переписать в виде:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E} \quad (5.20)$$

Обычно подвижность электронов значительно выше, чем подвижность дырок, поскольку перемещение дырки - более сложный процесс, связанный с перескоками многих электронов.

Примесная проводимость полупроводников. Некоторые примеси даже при малых их концентрациях очень сильно изменяют проводимость полупроводника. Такие примеси приводят к появлению избыточного количества или свободных электронов, или дырок. Их называют соответственно *донорными примесями* (отдающими электроны) или *акцепторными примесями* (забирающими электроны).

Получившийся после добавления донорных примесей полупроводник называют *донорным полупроводником*. Его также называют электронным (так как в нем - избыток свободных электронов) или же полупроводником *n*-типа: от слова *negative* - отрицательный, поскольку в нем - избыток отрицательных свободных носителей заряда.

На языке зонной теории появление "легко отрывающихся" электронов соответствует появлению в запрещенной зоне донорных уровней вблизи нижнего края зоны проводимости (см. рис. 5.7). Электрону для перехода в зону проводимости с такого уровня требуется меньше энергии, чем для перехода из валентной зоны, чему соответствует уход электрона из обычной ковалентной связи.

При увеличении температуры значительная часть электронов с малого числа донорных уровней перейдет в зону проводимости, кроме того, вероятность перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости станет значительной. Поскольку число уровней в валентной зоне много больше, чем число примесных уровней, то с ростом температуры различие увеличивающихся концентраций электронов и дырок станет менее заметно; они будут отличаться на малую величину - концентрацию донорных уровней. Донорный характер полупроводника при этом будет все менее и менее выражен. И, наконец, при еще большем повышении температуры концентрация носителей заряда в полупроводнике станет очень большой, и донорный полупроводник станет аналогичен беспримесному полупроводнику, а затем - проводнику, зона проводимости которого содержит много электронов.

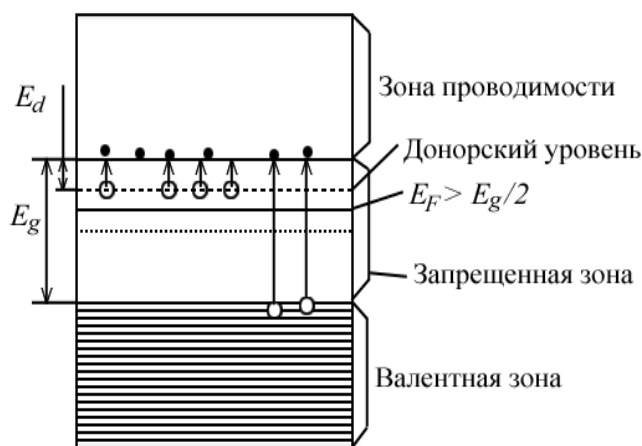


Рис. 5.7 Схема электронных состояний донорного полупроводника

Можно показать, что уровень Ферми в донорном полупроводнике смещается вверх по шкале энергии, причем это смещение больше при низких температурах, когда концентрация свободных электронов значительно превышает число дырок. При повышении температуры, когда донорный характер полупроводника становится все менее и менее выраженным, уровень Ферми смещается в среднюю часть запрещенной зоны, как в беспримесном полупроводнике.

На языке зонной теории переход электрона из полноценной ковалентной связи в связь с недостающим электроном соответствует появлению в запрещенной зоне акцепторных уровней вблизи нижнего края зоны проводимости (см. рис. 5.8). Электрону для такого перехода из валентной зоны на акцепторный уровень (при этом электрон просто переходит из одной ковалентной связи в почти такую же другую связь) требуется меньше энергии, чем для перехода из валентной зоны в зону проводимости, то есть для "полного ухода" электрона из ковалентной связи.

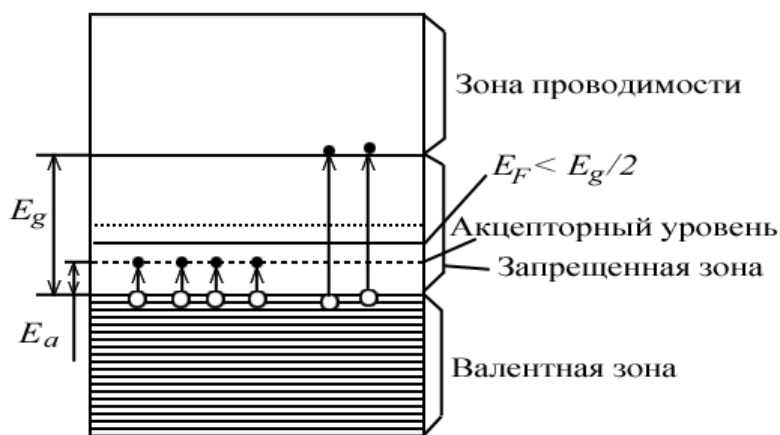


Рис. 5.8 Схема электронных состояний акцепторного полупроводника

При температурах порядка комнатной основной вклад в проводимость полупроводника будут давать дырки, образовавшиеся в валентной зоне после перехода валентных электронов на акцепторные уровни, вероятность же перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости будет очень мала.

При увеличении температуры значительная часть малого числа акцепторных уровней окажется занятой электронами. Кроме того, вероятность перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости станет значительной. Поскольку число уровней в валентной зоне много больше, чем число примесных уровней, то с ростом температуры различие увеличивающихся концентраций электронов и дырок станет менее заметно, так как они отличаются на малую величину - концентрацию акцепторных уровней. Акцепторный характер полупроводника при этом будет все менее и менее выражен. И, наконец, при еще большем повышении температуры концентрация носителей заряда в полупроводнике станет

очень большой, и акцепторный полупроводник станет аналогичен сначала беспримесному полупроводнику, а затем - проводнику.

Можно показать, что уровень Ферми в акцепторном полупроводнике смещается вниз по шкале энергии, причем это смещение больше при низких температурах, когда концентрация дырок значительно превышает концентрацию свободных электронов. При повышении температуры, когда акцепторный характер полупроводника становится все менее и менее выраженным, уровень Ферми смещается в среднюю часть запрещенной зоны, как в беспримесном полупроводнике.

Фотопроводимость полупроводников. Если на полупроводник падает поток квантов электромагнитных излучений с энергией $\hbar\omega$ большей ширины запрещенной зоны E_g , то возможен *внутренний фотоэффект в полупроводнике* - переход электронов, поглотивших квант излучения, из валентной зоны в зону проводимости. Из-за этого количество электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне и связанная с ними проводимость полупроводника возрастают. Явление увеличения проводимости полупроводника под влиянием падающих излучений получило название *фотопроводимость полупроводников*.

Это явление очень важно для физики, так как позволяет определить две важных характеристики полупроводника - ширину запрещенной зоны и *среднее время жизни носителей в полупроводнике*.

5.2 Магнитные свойства конденсированных сред.

Все известные вещества в зависимости знака их магнитной восприимчивости делятся на две большие группы: диамагнетики и парамагнетики. Среди парамагнитных веществ выделяют *магнитноупорядоченные вещества*, в которых наблюдается порядок в ориентации магнитных моментов соседних атомов, например в простейшем случае ферромагнетиков все магнитные моменты параллельны друг другу. Эта упорядоченность в расположении магнитных моментов обуславливает особенности не только магнитных, но и многих других физических свойств, например теплоемкости. Именно этим магнитноупорядоченным веществам, играющим важнейшую роль в современной технике, посвящена данная глава.

Упорядоченное расположение магнитных моментов атомов имеет электростатическую природу и связано с ограничениями, налагаемыми принципом Паули на вид волновой функции электронов. Понять это можно с помощью следующих рассуждений о виде волновой функции двух электронов, которые обобщаются и на случай произвольного числа электронов.

Волновую функцию $\Psi(\vec{r}_1; \vec{r}_2; \vec{s}_1; \vec{s}_2)$ двух электронов можно приближенно представить как произведение спиновой части $\Psi_s(\vec{s}_1; \vec{s}_2)$ на координатную часть $\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2)$, если считать спиновые переменные \vec{s}_1, \vec{s}_2 почти независимыми от координатных \vec{r}_1, \vec{r}_2 . Такое приближение считают корректным при малости спин-орбитального взаимодействия. Антисимметричность волновой функции электронов достигается в двух случаях: 1) антисимметрична ее спиновая часть (чему соответствует противоположное направление спинов), а координатная ее часть симметрична, или наоборот, 2) симметрична ее спиновая часть (чему соответствует сонаправленная ориентация спинов), координатная ее часть антисимметрична. Координатная часть симметричной волновой функции имеет вид: $\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2) + \Psi_{r1}(\vec{r}_2) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_1)$, а антисимметричной: $\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2) - \Psi_{r1}(\vec{r}_2) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_1)$.

Таким образом, различная взаимная ориентация спинов обязана изменять вид координатной части волновой функции электронов. С последней связана различная форма электронных облаков и различные значения энергии электростатической (кулоновской) энергии. Разность значений этой энергии для антипараллельной и параллельной ориентации

спинов или же для симметричной и антисимметричной координатной части волновой функции называют обменной энергией $U_{обм}$. Можно показать, что $U_{обм} = -2J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$. Величина J , называемая *обменным интегралом* зависит от формы облаков электронов, и главным образом, от вида их перекрытия.

Наибольшие значения J имеет для атомов с незаполненными внутренними электронными оболочками, например железа, хрома, марганца, кобальта, никеля, редкоземельных, а также трансурановых элементов. Как величина, так и знак обменного интеграла зависят от расстояния между атомами, поэтому J может быть различным для одной и той же пары атомов в различных химических соединениях. Это обуславливает, в частности, существование многих типов магнитного упорядочения.

Магнитная анизотропия. В кристалле энергия магнитного упорядочения зависит от ориентации магнитных моментов атомов и связанных с ними электронных оболочек относительно кристаллографических осей. На рис. 5.9 изображены два случая ориентировки магнитных моментов и связанных с ними электронных оболочек относительно направлений кубической решетки. Поскольку перекрытие электронных оболочек разное, то изображенным ориентациям оболочек должна отвечать разная электростатическая энергия их взаимодействия. Тогда и ориентации магнитных моментов по [100] или по [110] в заданном поле H (величиной достаточной для обеспечения почти полной упорядоченности в расположении магнитных моментов атомов) соответствует разная энергия. Эту энергию называют энергией *магнитной анизотропии*. Рассчитывают ее объемную плотность $U_{маг}$ обычно с помощью полуфеноменологических формул, приведенных в.

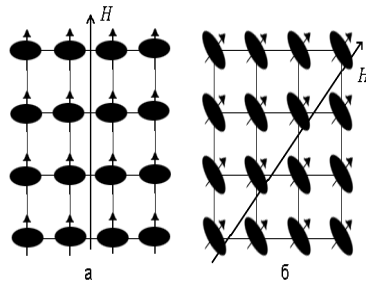


Рис. 5.9. Перекрытие электронных оболочек атомов в кристалле при различной ориентации магнитных моментов атомов и поля H

Магнитострикция. При ориентации магнитных моментов атомов и связанных с ними электронных оболочек вдоль одного направления неизбежно должны измениться равновесные расстояния между атомами вдоль различных направлений, поскольку асимметричные электронные оболочки будут взаимодействовать по-разному. Из-за этого изменятся геометрические размеры кристалла: вдоль одного направления они сожмутся, вдоль других - увеличатся. Это явление называется *магнитострикцией*.

Характеризуют магнитострикцию *константой магнитострикции насыщения*, показывающей относительное изменение длины кристалла в сильных магнитных полях H , обеспечивающих практически полный разворот всех моментов вдоль направления H . Эта константа имеет порядок 10^{-4} - 10^{-5} для большинства веществ. Однако существуют редкоземельные соединения, в которых наблюдается гигантская магнитострикция с константой порядка 10^{-3} . Существует и явление обратной магнитострикции, при котором деформация кристалла приводит к анизотропной ориентации электронных оболочек и связанных с ними магнитных моментов, а значит и появлению ненулевой намагниченности кристалла.

Величина обменного интеграла может быть положительной для ближайших соседей, что соответствует наиболее выгодной параллельной ориентации спинов и случаю *ферромагнетизма* (см. рис. 5.10 а), либо отрицательной, что соответствует наиболее

выгодной антипараллельной ориентации спинов и случаю *антиферромагнетизма* (см. рис. 5.10 б). Ферромагнетики и антиферромагнетики являются самыми простыми случаями магнитно-упорядоченных веществ. Самыми известными ферромагнетиками являются железо (с ОЦК решеткой) и никель (с ГЦК решеткой), а самыми известными антиферромагнетиками - хром и марганец. По рис. 5.10 (а, б) видно, что намагниченность ферромагнетика - значительная величина, а намагниченность антиферромагнетика близка к нулю.

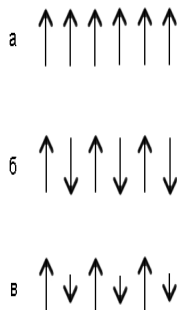


Рис. 5.10. Типы упорядоченного расположения спинов для случаев а) ферромагнетика, б) антиферромагнетика, в) ферримагнетика

В случае разных значений магнитных моментов атомов магнитные моменты отдельных атомов могут быть ориентированы антипараллельно, но иметь различную величину (см. рис. 5.10 в), что соответствует случаю *ферримагнетизма*. Намагниченность ферримагнетика, часто называемого "*феррит*", - значительная величина, хотя и несколько меньшая, чем для типичных ферромагнетиков.

Рассмотренное выше упорядоченное расположение магнитных моментов является идеализированным, поскольку не учитывает тепловое движение атомов, которое неизбежно приводит к некоторым нарушениям упорядоченного расположения магнитных моментов. При сравнительно низких температурах они незначительны, при увеличении температуры, они играют все большую роль, и, наконец, при некоторой температуре, называемой *температурой Кюри* (T_c), тепловое движение атомов способно разрушить упорядоченное расположение магнитных моментов, и тогда ферромагнетик превращается в парамагнетик.

Модель среднего поля. Некоторые модели, удачно описывающие многие свойства ферромагнетиков, вместо рассмотрения кулоновского взаимодействия электронных оболочек и связанного с ним обменного интеграла рассматривают *обменное магнитное поле* \vec{B}_E , часто называемое *молекулярным полем* или *полем Вейса*, которое обеспечивает упорядоченное расположение магнитных моментов. Можно оценить величину этого поля. Согласно этим моделям, обменное магнитное поле создается системой упорядоченно расположенных магнитных моментов и оно же обеспечивает их упорядоченное расположение. Забегая вперед отметим, что поле Вейса имеет величину на 1-2 порядка большую наблюдаемых макроскопических полей, что в принципе считают возможным в отдельных точках кристалла.

Самым простой из упомянутых выше моделей описания ферромагнетиков является *модель среднего поля*, в основе которой лежит предположение, что на каждый магнитный момент действует магнитное поле \vec{B}_E пропорциональное намагниченности \vec{J} вещества:

$$\vec{B}_E = \mu_0 \vec{J} \quad (5.21)$$

Здесь μ_0 - магнитная проницаемость вакуума.

Можно найти связь между параметрами T_c и λ . Для этого запишем связь между внешним полем \vec{B}_0 относительной магнитной восприимчивостью χ_r и величинами \vec{J} , \vec{B}_z , известную из электродинамики:

$$\mu_0 \vec{J} = \chi_r (\vec{B}_0 + \vec{B}_z) \quad (5.22)$$

В случае температур значительно превышающих T_c можно использовать закон Кюри, известный из теории парамагнетизма:

$$\chi = C / (T - T_c) \quad (5.23)$$

Это - сравнительно хорошо подтвержденный экспериментально закон Кюри-Вейса.

Намагниченность при температурах ниже T_c . Вычислим зависимость спонтанной намагниченности от температуры при $T < T_c$. Для простоты рассмотрим случай, когда $S = 1/2$. Тогда, согласно теории парамагнетизма, зависимость J от B и T имеет вид:

$$J = n \mu_s \cdot th(\mu_s B / kT) \quad (5.24)$$

Если $B_z \gg B_0$, то $B \approx B_z = \mu_s \lambda J$, и выражение для J примет вид:

$$J = n \mu_s \cdot th(\mu_s \mu_0 \lambda J / kT) \quad (5.25)$$

Спиновые волны. Теория спиновых волн рассматривает поведение магнитных моментов атомов (далее просто спинов, поскольку именно спиновый, а не орбитальный момент количества движения электронов обеспечивает наибольший вклад в свойства ферромагнетика) при низких температурах, когда ферромагнетик находится в основном состоянии, когда все спины параллельны друг другу. Для простоты рассматривают "линейную" цепочку из N спинов (см. рис. 5.7 а), каждый спин имеет спиновый момент $\hbar \vec{S}$; считают, что в цепочке взаимодействуют только ближайшие соседи. Энергию взаимодействия спинов в такой цепочке можно записать следующим образом:

$$U = -2J \sum_{j=1}^N \vec{S}_{j+1} \vec{S}_j \quad (5.26)$$

Через J здесь традиционно обозначают обменный интеграл. Тепловое движение при низких температурах может вносить "возбуждения" в эту систему, например, может переориентировать один из спинов в противоположную сторону. При этом две пары спинов будут противоположно направлены, и система спинов из-за этого приобретет дополнительную энергию:

$$\Delta U = 8JS^2 \quad (5.27)$$

Эта энергия - сравнительно велика меньшей энергии соответствующим возбуждения системы спинов, схематически изображенные на рис. 5.11. В этом случае при переходе от спина к спину происходит незначительная ориентация каждого спина, а само распределение ориентаций спинов напоминает волну. Поэтому такие возбуждения спиновой системы принято называть *спиновыми волнами*. Эти возбуждения квантуются, квант принято называть магноном и рассматривать как квантовую квазичастицу, подобно тому, как

рассматривали фононы и фотоны в главе 3 этой книги и в томе 5 данного курса. Можно показать, что каждый магنون уменьшает S_z -компоненту общего спина на единицу.

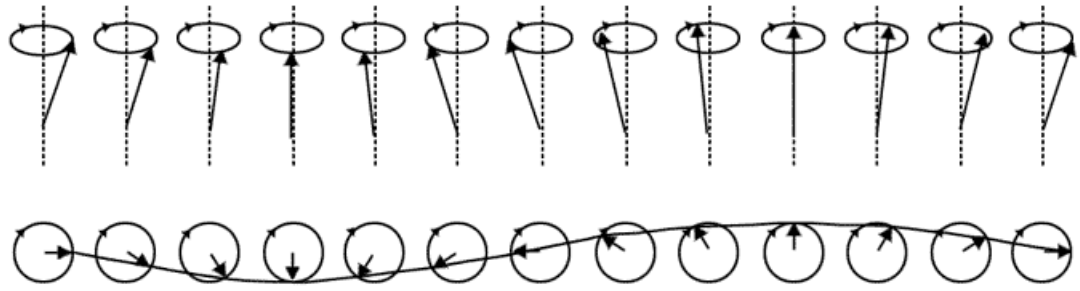


Рис. 5.11 Ориентация спинов в линейной цепочке атомов в случае спиновой волны: все спины почти сонаправлены. Распределение ориентировок спинов напоминает волну

Закон дисперсии $\omega(\vec{k})$ для магненов, возбуждаемых в рассмотренной цепочке или в реальной структуре.

$$\hbar \omega = 4JS(1 - \cos(Ka)) = 8JS \sin^2(Ka/2) \approx 2JS(Ka)^2$$

Зависимость энергии (или частоты $\omega(\vec{k})$) магненов от их волнового вектора \vec{k} может быть определена с помощью рассеяния нейтронов в точности по той же схеме, как это делается для фононов.

Можно показать, что энергия магненов $E(\vec{k})$ вычисляется по тем же формулам, что и для фотонов и фононов: как $E(\vec{k}) = \hbar\omega(\vec{k})$. Магноны рассматривают как бозоны и применяют к ним формулы статистики Бозе-Эйнштейна, с тем лишь отличием, что закон дисперсии для магненов другой. Также отметим, что магноны имеют одну поляризацию (а не три поляризации - как фононы или две - как фотоны в вакууме).

Вклад в теплоемкость ферромагнетиков вблизи T_c . Для многих ферромагнетиков магнитный вклад в теплоемкость сопоставим с вкладом обусловленным колебаниями кристаллической решетки, а вблизи T_c значительно превосходит его. Вблизи температуры Кюри зависимость $C_v(T)$ имеет максимум похожий на "зуб" вблизи T_c . На этом основан часто используемый метод определения T_c по экспериментально измеренной зависимости $C_v(T)$. Метод особо полезен для случая многофазных материалов с фазами неизвестного состава, тогда по T_c фаз можно получать сведения о составе этих фаз. Этот метод определения температуры разрушения доменной структуры применим и для случаев как антиферромагнетиков, так и ферримагнетиков и веществ с более сложной картиной упорядочения спинов.

Рассмотренная картина расположения магнитных моментов крайне редко распространяется целиком на весь кристалл, гораздо чаще области с одинаковой ориентацией магнитных моментов, называемые *доменами*, имеют размер порядка микрометра, сам же кристалл состоит из множества доменов, причем ориентация \vec{J} в соседних доменах не обязательно сонаправленная. Происхождение доменов связано со стремлением кристалла иметь как можно меньшую общую свободную энергию.

Границы соседних доменов образуют *доменную стенку* толщиной порядка нескольких межатомных расстояний, в которой происходит переориентация магнитных моментов. Очевидно, что такая переориентация сопряжена с дополнительной энергией, связанной как с энергией магнитной анизотропии, так и с энергией, связанной с взаимодействием не совсем

параллельных магнитных моментов вблизи доменной стенки, рассмотренной в разделе, посвященном спиновым волнам. Стремление свести к минимуму энергию магнитной анизотропии требует минимальной толщины доменной стенки, желательнее менее чем в 1 межатомное расстояние, поскольку при увеличении ее толщины возрастает число магнитных моментов, ориентированных не в направлении легкого намагничивания. Существованием доменов объясняется перемагничивание многих ферромагнетиков в очень малых магнитных полях.

5.3 Оптические свойства конденсированных систем.

Перераспределение электронов по энергетическим уровням в полупроводниках может происходить не только вследствие теплового движения, но и под действием электромагнитного излучения. Оптические эффекты в полупроводниках используются в разнообразных фотоприемниках, преобразователях солнечной энергии в электрическую и в ряде других оптоэлектронных приборов.

Под воздействием светового излучения нарушается термодинамическое равновесие и возникают неравновесные носители тока. Если энергия фотона превышает ширину запрещенной зоны, то поглотивший фотон электрон переходит из валентной зоны в зону проводимости и появляется дополнительная электронно-дырочная пара. Это явление называется внутренним фотоэффектом. Добавочная проводимость, возникающая при облучении полупроводника светом, называется фотопроводимостью. Основная проводимость, обусловленная тепловым возбуждением носителей, называется темновой проводимостью.

В собственных полупроводниках поглощение света происходит лишь в случае, максимальная длина волны определяется соотношением

$$\lambda_{\max} = hc/E_g$$

Если на поверхность полупроводника падает свет с частотой, удовлетворяющей соотношению, то возникающие на поверхности неравновесные носители диффундируют в глубь полупроводника и по пути рекомбинируют. Для невырожденных газов носителей коэффициенты диффузии электронов и дырок определяются соотношениями Эйнштейна: $D_n = kT u_n / e$ и $D_p = kT u_p / e$, где u_n и u_p - подвижности носителей (обычно $u_n > u_p$). Однако вследствие электростатического притяжения носителей разного знака происходит их совместная (амбиполярная) диффузия с некоторым одинаковым эффективным коэффициентом диффузии $D_{эфф}$. В общем случае:

$$D_{эфф} = (n + p) / (n/D_p + p/D_n)$$

Для собственного полупроводника ($n = p$): $D_{эфф} = 2D_n D_p / (D_n + D_p)$, т.е. является промежуточным между коэффициентами диффузии для электронов и дырок. В полупроводниках же с ярко выраженным типом проводимости эффективный коэффициент диффузии равен коэффициенту диффузии неосновных носителей. Так, $D_{эфф} = D_p$ при $n \gg p$ и $D_{эфф} = D_n$ при $p \gg n$.

Однако возможно также наличие фотоэлектрически неактивного поглощения. Оно возникает, например, когда возбужденный электрон не разрывает связи с дыркой, возникающей в валентной зоне, а образует с ней единую связанную систему. Такая система называется экситоном.

Если в веществе имеются примеси, электроны могут переходить с донорных уровней в зону проводимости и из валентной зоны на акцепторные уровни. Такое поглощение света называется примесным. Поскольку $E_{прим} \ll E_g$, граница примесного поглощения сдвинута в сторону длинных волн. Кроме того, если примесные атомы уже ионизированы, примесное поглощение отсутствует. Поэтому длинноволновое примесное поглощение будет наблюдаться при достаточно низких температурах, меньших температуры истощения

примеси ($T < T_s$). Обычно она составляет несколько десятков градусов Кельвина. Так, для Ge, легированного золотом, спектр примесного поглощения наблюдается при температуре жидкого азота (77K), а при легировании сурьмой поглощение можно наблюдать лишь при гелиевых температурах (4K).

На внутреннем фотоэффекте основано действие фотосопротивлений (фоторезисторов). Чувствительный элемент прибора представляет собой брусок или пленку полупроводника с двумя контактами, K_1 и K_2 . Его подключают к источнику напряжения через нагрузочное сопротивление R_H . При освещении находящегося под напряжением полупроводника в нем течет ток J . Разность между полным током J и темновым током J_T дает значений фототока :

$$J_{\phi} = J - J_T$$

Величина фотопроводимости G определяется как:

$$G = J_{\phi} / V_0 \quad ($$

где V_0 - разность потенциалов на полупроводнике.

Вольт-амперной характеристикой фотосопротивления называется зависимость J_{ϕ} от V_0 . Световая характеристика представляет собой зависимость J_{ϕ} от светового потока Φ при $V_0 = const$. Удельной чувствительностью γ называется величина:

$$\gamma_0 = G / \Phi = J_{\phi} / (V_0 \Phi). \quad ($$

Поскольку количество образующихся носителей пропорционально световому потоку Φ , фотосопротивления применяют в фотометрии.

Термин люминесценция означает все виды излучения, за исключением теплового. Люминесцентное свечение является неравновесным. Тела могут люминесцировать при любой температуре. Поэтому люминесценцию часто называют холодным свечением.

Люминесценция может вызываться различными причинами: под действием видимого света (фотолюминесценция), УФ излучения, бомбардировкой электронами или ионами, механическими деформациями, или химическими процессами. Характерной особенностью люминесценции является длительность, значительно превышающая период световых колебаний. В зависимости от длительности свечения, t , принято различать флюоресценцию ($t < 10^{-6}$ с) и фосфоресценцию ($t > 10^{-5}$ с).

Для придания люминесцентных свойств в основное вещество вводят активаторы в виде соответствующим образом подобранных чужеродных атомов, относительное количество которых не превышает сотых долей процента ($n/n_0 \sim 0,01$ %). Вещества, способные люминесцировать, называются люминофорами.

При освещении $p - n$ -перехода или прилегающих к нему областей светом, вызывающим генерацию электронно-дырочных пар, через переход потечет ток, называемый первичным фототоком. Возникающие при этом в p - области дырки и в n - области электроны являются неосновными носителями. Вследствие высокой концентрации основных носителей ее возрастанием за счет неравновесных носителей можно пренебречь.

В лазерах - приборах для генерации монохроматического узкополосного направленного электромагнитного излучения используется явление вынужденного испускания, при котором происходит усиление света. В отличие от самопроизвольного, спонтанного, излучения, которое наблюдается в обычных, близких к тепловому равновесию условиях, вынужденное излучение состоит в переходе электрона с верхнего энергетического уровня E_v на свободный нижний уровень E_n под действием световой волны с частотой $\nu = (E_v - E_n)/h$. При этом происходит излучение еще одного фотона с той же частотой и в том же направлении, в котором распространялся падающий фотон.

Если система первоначально находится на нижнем уровне E_n , то происходит поглощение фотона частоты ν . В условиях теплового равновесия заселенность нижнего энергетического состояния всегда выше, чем верхнего, и такими системами свет поглощается. Для усиления света необходимо создать условия, при которых заселенность верхних уровней превышает заселенность нижних, т.е. создать инверсную заселенность. Среда, в которой достигнута инверсная заселенность, называется активной.

В лазерах световая волна многократно проходит через среду, отражаясь от полупрозрачных зеркал. Если световая волна теряет при отражении меньше энергии, чем приобретает при прохождении через активную область, то ее интенсивность будет непрерывно возрастать. Происходит лавинообразное увеличение интенсивности света, т.е. возникает генерация. Так как при каждом отражении часть света проходит через зеркало, то растёт и интенсивность света, выходящего наружу.

Для возникновения генерации необходимо создание такой инверсной заселенности, при которой усиление света в активной области перекрывает бы все его потери, связанные с прохождением через диод и малым отражением от его зеркальных граней. Ток $J_{пор}$, при котором выполняется это условие, называется пороговым. При $J < J_{пор}$ лазер работает как обычный светодиод, испуская спонтанное излучение с равномерной плотностью во всех направлениях. Значительные внутренние потери связаны с прохождением света через пассивные области диода и его поглощением в активной области на свободных носителях и дефектах. В результате из светодиода выходит только около 2% излучения, возникающего в нем в результате излучательной рекомбинации.

5.4 Гальваномагнитные свойства конденсированных сред.

Свойства твердых тел в сильных электрических полях. Эффект Холла.

В сильных электрических полях нарушается пропорциональность между плотностью тока в полупроводнике и напряжённостью внешнего электрического поля. Это является следствием физических процессов, вызывающих изменение удельной проводимости полупроводника. Напряжённость поля, которую можно условно принять за границу между областью слабых I и сильных II полей, называют критической $E_{кр}$. Эта граница не является резкой и определенной и зависит от природы полупроводника, концентрации примесей и температуры окружающей среды.

Эффект Холла в полупроводниках. Рассмотрим образец полупроводника в виде прямоугольного параллелепипеда (см. рис. 5.12), вдоль стороны l которого течет ток плотности \vec{j} , а вдоль стороны b которого направлен вектор магнитной индукции \vec{B} . Эффект Холла состоит в появлении разности потенциалов, называемой холловской, между точками верхней и нижней граней, расположенных друг над другом (темные кружочки 1 и 2 на рис. 4.19). Этому эффекту дают изложенное ниже объяснение.

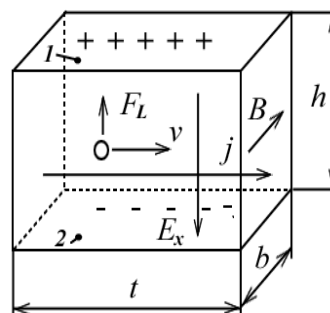


Рис. 5.12 Появление поверхностных зарядов и холловской напряженности электрического поля в акцепторном полупроводнике

Рассмотрим сначала акцепторный полупроводник. С плотностью тока \vec{j} связана дрейфовая скорость движения \vec{v}_d дырок - носителей заряда. На заряд e , движущийся в

магнитном поле, как известно из электродинамики, действует сила Лоренца \vec{F}_L , направленная на рис. 4.19 вверх:

$$\vec{F}_L = e[\vec{v}_h \times \vec{B}] \quad (5.27)$$

Дырки под воздействием \vec{F}_L начнут двигаться вверх и накапливаться на верхней грани, на верхней грани будет формироваться избыток положительного заряда, а на нижней - избыток отрицательного заряда. Эти заряды создадут электрическое поле \vec{E}_x , которое препятствует движению дырок вверх, действуя на них силой $e\vec{E}_x$. Когда заряда накопится столько, что сила $e\vec{E}_x$ уравнивает силу Лоренца, процесс накопления заряда прекратится и установится величина \vec{E}_x , отвечающая данным значениям \vec{v}_h и \vec{B} . Условие равновесия примет вид: $\vec{F}_L = e\vec{E}_x = e[\vec{v}_h \times \vec{B}]$. Заменяв в этом соотношении \vec{v}_h на \vec{j} из (4.28), получим более удобное для проведения экспериментов соотношение:

$$\vec{E}_x = \frac{[\vec{j} \times \vec{B}]}{en_h} = R[\vec{j} \times \vec{B}] \quad (5.28)$$

Все величины, входящие в эту формулу, могут быть измерены. Величина R называется *постоянной Холла*. Аналогичную формулу можно получить и для донорного полупроводника. Заметим, что знак R совпадает со знаком носителей заряда.

Рассмотрим теперь эффект Холла в случае сопоставимых значений концентраций электронов и дырок в полупроводнике. Пусть в образце полупроводника в виде прямоугольного параллелепипеда (см. рис. 5.13) концентрации соответственно электронов и дырок равны n_e и n_h , а подвижности соответственно электронов и дырок равны μ_e и μ_h .

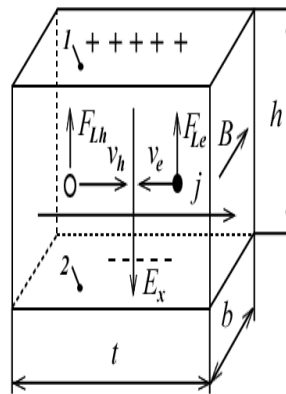


Рис. 5.13 Появление холловской напряженности электрического поля и поверхностных зарядов в полупроводнике с сопоставимыми концентрациями электронов и дырок

Вектор плотности тока \vec{j} , создаваемого электронами и дырками под воздействием электрического поля \vec{E}_i , пусть направлен вдоль стороны l и задается выражением:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E}_i \quad (5.29)$$

Вдоль стороны b от нас направлен вектор магнитной индукции \vec{B} , со стороны которого как на электрон, так и на дырку будут действовать силы Лоренца, направленные вверх. Под их воздействием электроны и дырки начнут двигаться вверх и накапливаться на верхней грани. Здесь они будут рекомбинировать. Пусть для определенности дырок будет приходиться к верхней грани больше, чем электронов. Тогда на верхней грани будет постепенно накапливаться избыток дырок, а на нижней - избыток электронов. Тогда появится холловская напряженность электрического поля \vec{E}_x , направленная вниз. Это поле будет препятствовать дыркам и помогать электронам двигаться вверх. Через некоторое время установится такая \vec{E}_x , при которой плотности потока электронов $\vec{j}_{e\uparrow}$ и дырок $\vec{j}_{h\uparrow}$ вверх сравняются, и прекратятся накопление заряда на верхней грани и рост \vec{E}_x . Условие равновесия можно записать в проекции на вертикальное направление так:

$$n_h \mu_h F_L - n_h \mu_h E_x = n_e \mu_e F_L + n_e \mu_e E_x \quad (5.30)$$

$$n_h \mu_h (E_x \mu_h) B e - n_h \mu_h E_x e = n_e \mu_e (E_x \mu_e) B e + n_e \mu_e E_x e \quad (5.31)$$

Из этого соотношения можно найти отношение E_x / E_z как:

$$E_x / E_z = B(n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / (n_h \mu_h + n_e \mu_e) \quad (5.32)$$

$$R = (n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / \{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 e\} \quad (5.33)$$

если полупроводник - беспримесный, у которого $n_h = n_e$:

$$E_x / E_z = B(\mu_h - \mu_e) \quad (5.34)$$

5.5. Сверхпроводящие свойства конденсированных сред.

Еще в 1913 году были проделаны опыты, показавшие, что сверхпроводящее состояние вещества можно разрушить не только путем нагревания образца, но и посредством пропускания через него электрического тока I , большего некоторого критического значения ($I > I_c$), либо помещением образца, находящегося в сверхпроводящем состоянии, в магнитное поле с напряженностью $H > H_c$, где H_c - критическое значение напряженности магнитного поля. Здесь мы подробно остановимся на втором явлении.

В 1933 году Мейсснер и Оксенфельд экспериментально установили, что если длинный сверхпроводник охлаждать в продольном магнитном поле от температуры, большей точки перехода в сверхпроводящее состояние, то в точке перехода линии индукции будут выталкиваться из проводника (рис. 5.14). Это явление было названо *эффектом Мейсснера*.

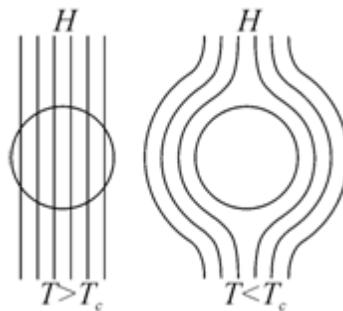


Рис. 5.14. Выталкивание силовых линий магнитного поля из сверхпроводника

Выталкивание магнитного поля из образца означает, что в нем магнитная индукция B равна нулю. Тем самым сверхпроводник является не только идеальным проводником, но и идеальным диамагнетиком. Это явилось чрезвычайно важным открытием. Ведь если магнитная индукция $B = 0$, независимо от предыстории, то это равенство может служить характеристикой сверхпроводящего состояния, которое возникает при значениях магнитных полей, меньших критического $H < H_c$. Тогда переход в сверхпроводящее состояние можно рассматривать как фазовый переход в новое фазовое состояние и использовать для исследования сверхпроводимости термодинамические характеристики вещества.

Если начать увеличивать напряженность внешнего поля H , в котором находится образец, имеющий форму бесконечного сплошного цилиндра (ось цилиндра направлена по полю), то при критическом значении напряженности поля H_c сверхпроводимость разрушается и образец переходит в нормальное состояние. Критическое поле зависит от температуры. Чем ближе температура к критической T_c , тем меньше величина H_c , и тем легче разрушается состояние сверхпроводимости. На рис. 5.15 показано, как с ростом температуры изменяется величина критического поля. Наиболее устойчиво сверхпроводящее состояние при абсолютном нуле: значение $H_c(0)$, соответствующее $T=0$, максимально. При $T = T_c$ величина критического магнитного поля обращается в нуль. Зависимость $H_c(T)$ приближенно описывается формулой

$$H_c(T) = H_c(0) \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right) \quad (12.2)$$



Рис. 5.15. Схематическая фазовая диаграмма, иллюстрирующая нормальное и сверхпроводящее состояние сверхпроводника

Исчезновение магнитного поля внутри сверхпроводника связано с появлением при его охлаждении ниже критической температуры T_c в магнитном поле незатухающих поверхностных токов. Поверхностные токи создают внутри образца магнитное поле, равное по величине и противоположное по направлению внешнему полю. В результате внешнее магнитное поле внутри сверхпроводника компенсируется.

Пусть цилиндрический сверхпроводник помещен во внешнее магнитное поле $H_{\text{вн}}$ (рис. 5.16).

Поскольку при включении внешнего магнитного поля оно изменяется не мгновенно, то внутри образца индуцируется вихревое электрическое поле, создающее вихревой ток $i_{\text{вн}}$. Вихревой ток $i_{\text{вн}}$ приводит к появлению магнитного поля $H_{\text{вн}}$, направленного против внешнего поля $H_{\text{вн}}$ и компенсирующего его. Поле $H_{\text{вн}}$ создает, в свою очередь, ток $i_{\text{вн}}$, компенсирующий вихревой ток $i_{\text{вн}}$.

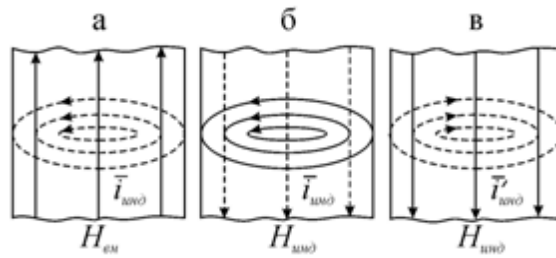


Рис. 5.16 Схема, иллюстрирующая процесс компенсации внешнего магнитного поля ($H_{вн}$) индуцированным внутри сверхпроводника полем ($H_{инд}$)

В результате внутри образца происходит компенсация поля $H_{вн}$ полем $H_{инд}$ и тока $i_{инд}$ током $i'_{инд}$. Весь наведенный ток будет протекать в тонком приповерхностном слое λ , в котором локализуется и магнитное поле тока, компенсирующее внешнее магнитное поле в образце.

После завершения переходных процессов в образце устанавливается такое стационарное состояние, что внутреннее электрическое поле равно нулю ($E_{внутр} = 0$), приповерхностный ток постоянен ($i_{инд} = const$) и внутреннее магнитное поле равно нулю ($H_{внутр} = 0$). Первые два условия соответствуют идеальной проводимости, третье – идеальному диамагнетизму.

По характеру проникновения магнитного поля в сверхпроводники их подразделяют на два класса – I и II рода.

К *сверхпроводникам I рода* относятся все чистые металлы, за исключением ниобия, ванадия и технеция. Отличительной особенностью сверхпроводников первого рода является то, что проникновение в них магнитного поля происходит до тех пор, пока напряженность поля не превысит некоторого значения $H_c(T)$.

Полное экранирование внутреннего поля сверхпроводников первого рода от внешнего поля (эффект Мейснера) происходит во всей области существования сверхпроводимости. Если же внешнее поле меньше критического H_c , то образец возвращается в нормальное состояние, и имеет место полное проникновение поля внутрь образца. При этом сверхпроводимость утрачивается скачком. Фазовый переход из несверхпроводящего в сверхпроводящее состояние характеризуется тем, что в энергетическом спектре электронов проводимости появляется щель конечной ширины. Поэтому говорят о щелевом характере энергетического спектра электронов проводимости в сверхпроводнике первого рода. Более подробное обсуждение этого вопроса будет проведено ниже.

Сверхпроводники II рода характеризуются тем, что в них существует два критических поля. При поле меньше нижнего критического H_{c1} магнитный поток не проникает в сверхпроводник. Если поле повышать до верхнего критического H_{c2} , то при переходе через него образец переходит в нормальное состояние, и поле полностью проникает в него (т. е. образец становится обычным проводником). При средних значениях поля имеет место частичное проникновение поля в образец (*смешанное состояние*, или *фаза Шубникова*).

Критическое поле H_c определяет разность удельных свободных энергий сверхпроводящей и нормальной фаз. Существование для сверхпроводника критического поля приводит к невозможности прохождения тока, плотность которого больше некоторого критического значения. Если этот порог преодолен, то сверхпроводимость разрушается.

Из данных рентгеноструктурного анализа следует, что при переходе в сверхпроводящее состояние ни симметрия кристалла, ни периоды его решетки не изменяются. Неизменной остается и температура Дебая, связанная с колебаниями ионов в кристаллической решетке. Следовательно, сверхпроводимость не связана со структурными изменениями.

В 1950 году Максвелл и Рейнольдс показали, что различным изотопам сверхпроводников присущи различные критические температуры T_c . Эта закономерность получила название *изотопического эффекта*. Изотопический эффект указывает на связь сверхпроводящего состояния с особенностями кристаллической структуры. Это обусловлено взаимодействием электронов с колебаниями атомов решетки (фононами), энергия которых меняется при изменении массы атомов, находящихся в узлах решетки. Интересно, что именно это взаимодействие также ответственно за появление электрического сопротивления.

Обсудим качественно, каким образом может происходить взаимодействие электронов между собой через колебания решетки. Пусть свободный электрон с волновым вектором \vec{k}_1 распространяется по кристаллу. В какой-то момент времени он возбудил колебание решетки, т. е. возникает фонон (которого до этого не существовало), и электрон переходит в другое состояние с волновым вектором \vec{k}'_1 . Волновой вектор возникшего фонона обозначим через \vec{q} . При этом должен выполняться закон сохранения импульса, который в этом случае можно записать в виде

$$\vec{k}_1 = \vec{k}'_1 + \vec{q}$$

Возникший фонон может поглотиться другим электроном с волновым вектором \vec{k}_2 , который в результате столкновения перейдет в состояние \vec{k}'_2 . Следовательно, до возникновения фонона существовали два электрона в состояниях с волновыми векторами \vec{k}_1 и \vec{k}_2 , а после возникновения фонона они оказались в состояниях \vec{k}'_1 и \vec{k}'_2 . Значит, произошло рассеяние электронов друг на друге, причем

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}'_1 + \vec{k}'_2$$

Но такое рассеяние двух частиц может происходить только при их взаимодействии.

Обратимся теперь к вопросу о знаке этого взаимодействия. В момент, когда электрон переходит из состояния \vec{k}_1 в состояние \vec{k}'_1 , возникает колебание электронной плотности с частотой $\omega = (\varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k'_1}) / \hbar$, где ε_{k_1} и $\varepsilon_{k'_1}$ соответственно энергии электрона в состояниях \vec{k}_1 и \vec{k}'_1 . Предположим, что в результате колебаний электронной плотности в каком-то месте произошло ее локальное увеличение. Ионы начнут притягиваться к данной области и, обладая большой массой, даже после того, как скомпенсируют избыток электронов, будут продолжать свое первоначальное движение, т. е. произойдет перекомпенсация. В результате в указанной области появится избыточный положительный заряд, и второй электрон с волновым вектором \vec{k}_2 начинает притягиваться к области где электронная плотность испытывает локальное увеличение. Принято говорить, что под действием отрицательного заряда решетка поляризуется. Так возникает эффективное притяжение между электронами с волновыми векторами \vec{k}_1 и \vec{k}_2 .

Рассмотрим все потенциальные возможности рассеяния электрона, находящегося на верхнем уровне правой полужоны (рис. 12.11):

- упругое рассеяние с изменением волнового вектора \vec{k} на $-\vec{k}$;
- переходы на левые нижние уровни;
- переходы на верхние левые уровни.

При наличии энергетической щели переходы 1 запрещены, т. к. ведут в область запрещенных энергий E_w ; переходы типа 2 запрещены согласно принципу Паули, поскольку

на этом энергетическом уровне уже находятся два электрона с противоположными спинами; переходы 3, хотя и разрешены, но требуют дополнительных затрат энергии, равных $E_{\text{щ}}$.

Если температура достаточно низкая, так что энергия фонона $\hbar\omega < E_{\text{щ}}$, то эти переходы не реализуются. Таким образом, в металле, зонная структура которого обладает такой энергетической щелью, процессы рассеяния в определенных условиях протекать не будут. Поэтому металл может приобрести идеальную проводимость, свойственную сверхпроводникам.

В настоящее время разработан целый ряд методов, позволяющих не только обнаружить энергетическую щель в сверхпроводящих металлах, но и измерить ее ширину. Один из них основан на изучении поглощения электромагнитных волн далекой инфракрасной области.

Если на сверхпроводник направить поток электромагнитных волн и непрерывно менять их частоту ω , то до тех пор, пока энергия кванта $\hbar\omega$ этого излучения остается меньше ширины щели $E_{\text{щ}}$, энергия излучения не поглощается. При некоторой критической частоте ω_c , для которой $\hbar\omega_c = E_{\text{щ}}$, начинается интенсивное поглощение излучения, которое возрастает до его значений в нормальном металле. Измерив критическую частоту ω_c , можно определить ширину энергетической щели $E_{\text{щ}}$.

Теория Бардина–Купера–Шриффера приводит к следующему приближенному выражению, связывающему критическую температуру T_c с шириной энергетической щели $E_{\text{щ}}$:

$$E_{\text{щ}} = 3,5 \cdot k_B T_c$$

Явление сверхпроводимости не является свойством отдельных атомов, в частности, экспериментальные результаты показывают, что серое олово является полупроводником, а белое – металлом с температурой перехода в сверхпроводящее состояние $T_c = 3,72$ К. Очень странным казалось, что такие хорошие проводники, как медь, золото, серебро, не становятся сверхпроводниками ни при каких температурах. Это приводит к выводу, что для возникновения сверхпроводимости необходимо сильное взаимодействие электронов с решеткой, т. е. ситуация, когда электроны испытывают со стороны решетки сильное сопротивление своему движению под действием электрического поля.

Итак, между носителями сверхпроводящего тока существует жесткая фазовая корреляция. Купером было показано, что носителями сверхпроводящего тока являются частицы с зарядом, равным удвоенному заряду электрона $2e$, которые получили название *куперовских пар*.

Свободный электрон зоны проводимости, двигаясь сквозь решетку и взаимодействуя с ионами, слегка «оттягивает» их из положения равновесия, создавая в «кильватере» своего движения избыточный положительный заряд.

Избыточный положительный заряд может притянуть другой электрон. В результате в металле, помимо кулоновского отталкивания между электронами, может возникать *косвенная сила притяжения*, связанная с наличием решетки положительных ионов. Если эта сила оказывается больше силы отталкивания, то энергетически выгодным становится объединение электронов в пары.

Куперовская пара состоит из двух электронов, движущихся вокруг индуцированного ими же положительного заряда. В какой-то мере такая конфигурация напоминает атом гелия. Однако, в отличие от него, положительный заряд здесь не является постоянным и строго фиксированным. Кроме того, энергия связи в паре на много порядков ниже энергии связи в атоме гелия. Для куперовских пар энергия связи равна $10^{-2} + 10^{-3}$ эВ, тогда как в атоме гелия она 24,6 эВ. Расчет показывает, что эффективный диаметр куперовской пары $L \approx 10^{-7} + 10^{-6}$ м (длина когерентности). В объеме L^3 , занимаемом парой, таким образом размещаются центры

масс еще около 10^6 других пар. Поэтому куперовские пары нельзя рассматривать как пространственно разделенные квазимолекулы.

Физическая причина появления связанного состояния электронов, которая приведена выше, может служить только в качестве довольно грубой модели реального положения вещей. Доказательство этого состояния было проведено в 1956 году Купером и является квантово-механической задачей, которая здесь рассматриваться не будет. Отметим лишь, что возникающее огромное перекрытие волновых функций электронных пар усиливает квантовый эффект спаривания электронов до его макроскопического проявления. Такие эффекты называют *коллективными*. Таким образом, в образовании пар участвуют как весь коллектив электронов Ферми, так и атомы решетки.

В 1962 году Джозефсоном был теоретически предсказан эффект *слабой сверхпроводимости*. Этот эффект, позднее обнаруженный на опыте, еще раз подтвердил тот факт, что сверхпроводимость является квантовым эффектом. Под термином «слабая сверхпроводимость» понимаются сверхпроводящие явления в системах со слабо связанными сверхпроводниками, т. е. когда в сверхпроводящей цепи имеется участок, в котором тем или иным способом сверхпроводимость подавлена (своеобразное «слабое звено»).

Джозефсон проанализировал ситуацию, когда сверхпроводящий ток способен течь через контакт между двумя сверхпроводниками, разделенными очень тонким слоем диэлектрика. Обнаруженный впоследствии на практике, этот эффект был назван *эффектом Джозефсона*.

Различают *стационарный и нестационарный эффекты Джозефсона*. Первый из них состоит в возможности протекания постоянного тока через туннельный контакт между сверхпроводниками, заполненный диэлектриком толщиной 1–2 нм. Существенно то, что сверхпроводящий ток в этом случае протекает через барьер, характеризующийся нулевой разностью потенциалов.

Сверхпроводники, характеризуются электронной упорядоченностью, фазовой когерентностью. При этом все электронные пары в данном сверхпроводнике характеризуются волновыми функциями, имеющими одинаковую фазу, и ток отсутствует ($\Delta\varphi=0$). Однако, если образовать туннельный контакт, состоящий из двух различных сверхпроводников, то через такой контакт, даже в отсутствие разности потенциалов $V=0$, потечет ток, зависящий от разности фаз $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$. Плотность этого тока (*тока Джозефсона*) описывается следующим простым соотношением:

$$j = j_0 \sin \varphi$$

Это явление непосредственно определяется такой фундаментальной квантово-механической характеристикой, как фаза волновой функции.

Нестационарный эффект Джозефсона проявляется в том случае, когда к туннельному контакту прикладывается постоянная разность потенциалов. Обнаружено, что в этом случае через такой контакт потечет переменный сверхпроводящий ток. Этот переменный ток так же, как, например, ток в колебательном контуре, будет излучать электромагнитные волны, и это излучение наблюдается на опыте. В 1965 году в Харькове Янсоном, Свистуновым и Дмитриенко впервые было обнаружено джозефсоновское электромагнитное излучение.

Куперовские пары, переходя через слой диэлектрика, приобретают энергию $2eU$ (U – разность потенциалов, приложенная к контакту). В обычном металле эта энергия была бы необходима для преодоления сил сопротивления. При протекании же сверхпроводящего тока не требуется затрат энергии, и полученная электронной парой энергия $2eU$ излучается в виде кванта с энергией $\hbar\nu = 2eU$. На опыте действительно наблюдалось излучение с частотой $\nu = 2eU/\hbar$. Поскольку излучать энергию может только переменный ток, то именно такой ток и течет через *контакт Джозефсона*.

В течение достаточно большого промежутка времени усилия многих ученых, работающих в области сверхпроводимости, были направлены на поиск материалов с высокой критической температурой. Такие сверхпроводники были получены в середине 80-х годов прошлого века и названы высокотемпературными сверхпроводниками (ВТСП).

В 1986 году Беднорц и Мюллер установили, что керамика LaBaCuO переходит в сверхпроводящее состояние при температуре, близкой к 85 К. Фазой, ответственной за сверхпроводимость, была $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}$.

Наиболее высокотемпературным сверхпроводником считается керамика Tl-Ba-Ca-Cu-O ($T_c \approx 125 \text{ K}$).

В настоящее время к ВТСП относятся соединения, основанные на оксидах меди и имеющие температуру сверхпроводящего перехода в области азотных (выше 77 К) температур. Учитывая такой состав ВТСП, их называют часто металлооксидами, или купратами. Сейчас известно более двух десятков высокотемпературных сверхпроводников, которые являются купратами различных металлов.

Эффект высокотемпературной сверхпроводимости можно охарактеризовать следующими общими свойствами и явлениями:

1. Высокотемпературной сверхпроводимостью обладают оксиды металлов в соединениях с ионной связью, в отличие от обычных сверхпроводников, которые в нормальном состоянии представляют собой металлы или их сплавы.
2. В нормальном состоянии при $T > T_c$ ВТСП соединения имеют удельное сопротивление намного большее, чем у обычных металлов.
3. Все изученные металлооксиды имеют слоистую структуру с ромбической или тетрагональной симметрией и с чередованием слоев вдоль оси c . Для самого высокотемпературного сверхпроводника $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ общим является слой CuO_2 – купратный слой.
4. Как следует из данных РСА, кристаллическая структура ВТСП не изменяется при переходе через критическую температуру T_c .
5. Так же, как и в нормальных сверхпроводниках, в ВТСП обнаружена зависимость критической T_c от массы атомов (изотопический эффект). Например, замена ^{16}O на ^{18}O в лантановой керамике приводит к понижению T_c на 0,5 К. Аналогичный эффект наблюдается и для иттриевых сверхпроводников. Такое поведение ВТСП, возможно, в определенной степени обусловлено особенностями колебаний кристаллической решетки.
6. Переход к состоянию с нулевым сопротивлением в ВТСП осуществляется в более широком температурном интервале по сравнению с чистыми сверхпроводниками.
7. В магнитном поле высокотемпературные сверхпроводники ведут себя аналогично нормальным сверхпроводникам. Здесь также имеет место эффект Мейснера, т. е. ВТСП являются идеальными диамагнетиками. Сверхпроводимость разрушается под действием магнитного поля, большего некоторой критической величины. По характеру исчезновения сверхпроводимости ВТСП относят к сверхпроводникам II рода. Как и в обычных сверхпроводниках, в ВТСП имеются куперовские пары, и наблюдается квантование магнитного потока.
8. В отличие от обычных сверхпроводников, в ВТСП металлооксидах наблюдается магнитное упорядочение антиферромагнитного типа. Оно наступает при T_N (температуре Нееля) $T_N \ll T_c$ и приблизительно равно 2 К. Наиболее изученным в этом плане является оксид $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. T_N здесь очень сильно зависит от состава. Для $x=0$ (т. е. La_2CuO_4), $T_N = 240 \text{ K}$, а по электрическим свойствам это диэлектрик. При $x \geq 0,06$ температура Нееля T_N резко падает. Сверхпроводимость и антиферромагнетизм при этом существуют одновременно.
9. В ВТСП удается осуществить Джозефсоновский туннельный сверхпроводящий ток сквозь тонкий слой диэлектрика.

10. При $T = T_c$ наблюдается скачок теплоемкости. В области низких температур зависимость теплоемкости от температуры имеет линейный характер. Его связывают с исчезновением энергетической щели вдоль части поверхности Ферми.

ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

Задания к практическим занятиям формируются на основе задачника [3] дополнительного списка литературы по ниже приведенным темам. Для закрепления пройденного материала студентам предлагается прорешать несколько домашних задач, правильность решения которых проверяется на следующем практическом занятии.

№ п/п	№ раздела (темы) дисциплины	Тематика практического занятия	Трудоемкость в часах
1	Модуль 1	Химические связи. Энергия связи кристалла.	4
2	Модуль 2	Дефекты в кристаллах.	2
3	Модуль 3	Механические свойства твердых тел.	2
4	Модуль 4	Колебания атомов кристаллической решетки. Теплоемкость твердых тел.	4
5	Модуль 5	Электронный газ в металлах. Проводимость собственных и примесных полупроводников. Диэлектрики. Диамагнетизм и парамагнетизм.	6

В начале практического занятия студентам предлагается вспомнить основные законы и формулы по теме занятия, при этом можно использовать такой интерактивный метод обучения как «Мозговой штурм». Далее зачитывается условие задачи, и проводится предварительный разбор задачи вместе с аудиторией, после этого любому желающему студенту предлагается изложить решение задачи на доске.

3 Методические указания (рекомендации)

3.1 Методические указания для преподавателей

Дисциплина «Физика конденсированного состояния вещества» относится к циклу специальных дисциплин, региональная компонента. Для изучения дисциплины предусмотрена аудиторная и самостоятельная формы работы.

В пунктах 3 и 5 рабочей программы приведены формы текущего, итогового контроля и форма самостоятельной работы. К аудиторным видам работы относятся лекции и практические занятия.

На лекциях излагается основной материал по темам дисциплины. Подготовка лекции непосредственно начинается с разработки структуры рабочего лекционного курса по конкретной дисциплине. Количество лекций определяется с учетом общего количества часов, отведенных для лекционной работы.

Структура лекционного курса обычно включает в себя вступительную, основную и заключительную части. После определения структуры лекционного курса по темам можно приступить к подготовке той или иной конкретной лекции.

Методика работы над лекцией предполагает примерно следующие этапы:

- выяснение того, что и в каком объеме было изучено студентами ранее по родственным дисциплинам;
- определение места изучаемой дисциплины в учебном процессе подготовки специалиста;
- отбор материала для лекции;
- определение объема и содержания лекции;
- выбор последовательности и логики изложения, составление плана лекции;
- подбор иллюстративного материала;
- выработка манеры чтения лекции.

Отбор материала для лекции определяется ее темой. Следует тщательно ознакомиться с содержанием темы в базовой учебной литературе, которой пользуются студенты. Выяснить, какие аспекты изучаемой проблемы хорошо изложены, какие данные устарели и требуют корректировки. Следует определить вопросы, выносимые на лекцию, обдумать обобщения, которые необходимо сделать, выделить спорные взгляды и четко сформировать свою точку зрения на них.

Определение объема и содержания лекции – ещё один важный этап подготовки лекции, определяющий темп изложения материала. Это обусловлено ограниченностью временных рамок, определяющих учебные часы на каждую дисциплину. Не рекомендуется идти по пути планирования чтения на лекциях всего предусмотренного программой материала в ущерб полноте изложения основных вопросов. Лекция должна содержать столько информации, сколько может быть усвоено аудиторией в отведенное время. Лекцию нужно разгружать от части материала, переносить его на самостоятельное изучение. Самостоятельно изученный студентами материал, наряду с лекционным, выносится на экзамен. Если лекция будет прекрасно подготовлена, но перегружена фактическим (статистическим, и т.п.) материалом, то она будет малоэффективной и не достигнет поставленной цели.

Кроме того, при выборе объема лекции необходимо учитывать возможность «среднего» студента записать ту информацию, которую он должен обязательно усвоить. Приступая к решению вопроса об объеме и содержании лекции, следует учитывать ряд особенных, специфических черт этого вида занятия, в том числе и дидактическую характеристику лекции. Лекция входит органичной частью в систему учебных занятий и должна быть содержательно увязана с их комплексом, с характером учебной дисциплины, а также с образовательными возможностями других форм обучения.

Содержание лекции должно отвечать ряду дидактических принципов. Основными из них являются: целостность, научность, доступность, систематичность и наглядность.

После определения объёма и содержания лекции, необходимо с современных позиций проанализировать состояние проблемы, изложенной в учебных материалах, и составить расширенный план лекции.

На практических занятиях проводится коллективное обсуждение теоретического материала изучаемых тем, проводится решение задач, разбор конкретных практических ситуаций. Практические занятия являются одним из основных этапов в процессе обучения, составляя вместе с лекционным курсом единый комплекс подготовки специалиста. Планирование практических занятий осуществляется с учётом установленного количества часов.

Основные этапы планирования и подготовки занятий:

- Разработка системы занятий по теме или разделу.
- Определение задач и целей занятия.
- Определение оптимального объема учебного материала, расчленение на ряд законченных в смысловом отношении блоков, частей.
- Разработка структуры занятия, определение его типа и методов обучения.
- Нахождение связей данного материала с другими дисциплинами и использование этих связей при изучении нового материала.
- Подбор дидактических средств (фильмов, карточек, плакатов, схем, вспомогательной литературы).
- Определение форм и методов контроля знаний студентов.
- Определение самостоятельной работы по данной теме.

При проведении практических занятий преподаватель уделяет внимание формулировкам выводов, способности студентов сравнивать, анализировать, находить несоответствия, оценивает уровень знаний студентов.

При подведении итогов преподаватель знакомит студентов с результатами выполнения заданий, оценивает качество выполненной работы каждым студентом.

В учебном плане по каждой дисциплине имеется графа «Самостоятельная работа» с указанием количества часов, отведенных на эту работу. В рабочей программе дисциплины предусмотрен раздел «Самостоятельная работа», в котором должны быть изложены:

1. Количество часов, выделенных в учебном плане на самостоятельную работу.
2. Число заданий на самостоятельную работу, которое студент должен выполнить в процессе изучения дисциплины.
3. Краткое содержание каждого задания.
4. Сроки и формы промежуточного контроля по выполненным заданиям.

Все виды самостоятельной работы, предусмотренные в рабочей программе по каждой дисциплине, должны быть обеспечены методическими указаниями, являющимися неотъемлемой частью методического обеспечения читаемой дисциплины.

В ходе самостоятельной работы студент осваивает теоретический материал по дисциплине (освоение лекционного курса, а также освоение отдельных тем), закрепляет знание теоретического материала подготовка и выполнение работ по физическому практикуму и выполнение расчетно-графических работ.

К видам самостоятельной работы в пределах данной дисциплины относятся:

- 1) написание конспектов по темам, прочитанных на лекциях в краткой форме,
- 2) выполнение домашних заданий,
- 3) подготовка к контрольной работе,
- 4) подготовка к практическим занятиям,
- 5) подготовка экзамену по дисциплине.

В процессе накопления опыта проведения самостоятельной работы возможно появление и других её видов, не входящих в вышеприведённый перечень.

Перед выдачей заданий на самостоятельную работу преподаватель читает вводную лекцию, в которой излагаются:

1. Тема задания, алгоритм его выполнения.

2. Перечень литературы, необходимой для выполнения задания.
3. Комплекс задач, которые студент обязан решить.
4. Порядок текущего контроля за выполнением самостоятельной работы.
5. Краткое содержание методических указаний по выполнению самостоятельной работы и место, где можно получить эти методические указания.
6. Форма представления выполненного варианта задания.
7. Методика контроля по выполненному заданию .

Критериями оценки результатов работы студентов в течение студента являются: уровень освоения студентом учебного материала, умения студента использовать теоретические знания при выполнении практических задач, обосновать четкость изложения ответов. По окончании курса студенты обязаны сдать зачет и экзамен. Сроки проведения итогового контроля устанавливается графиком учебного процесса. При проведении итогового контроля по дисциплине преподаватель должен оценить уровень сформированности у студентов умений и навыков при освоении программы дисциплины.

3.2 Методические указания для студентов

В процессе изучения лекционного материала рекомендуется использовать не только опорные конспекты, но и учебники и учебные пособия. Перед каждой лекцией рекомендуется просмотреть материал по предыдущей лекции.

Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям и выполнению домашних задач.

1. Для подготовки к практическим занятиям используйте конспекты лекций, учебники и учебные пособия, указанные в списке рекомендуемой основной и дополнительной литературы.
2. Просмотрите те вопросы теории, освещающие разбираемую тему.
3. На практических занятиях целесообразно иметь при себе конспекты лекций, учебники и учебные пособия.
4. При выполнении домашних задач внимательно просмотрите решение аналогичных задач, рассматриваемых на учебных занятиях, осмыслите методы и методические приемы, используемые при их решении.
5. Освоив методику решения данного класса задач, приступайте к решению задач.

3.3 Методические рекомендации по самостоятельной работе студентов

Самостоятельная работа студентов – это процесс активного, целенаправленного приобретения студентом новых для него знаний и умений без непосредственного участия преподавателей. Самостоятельная работа сопровождается эффективным контролем и оценкой ее результатов.

Предметно и содержательно самостоятельная работа определяется государственным образовательным стандартом, действующим учебным планом, рабочей программой дисциплины, средствами обеспечения самостоятельной работы.

Самостоятельная работа – это важнейшая часть любого образования. Для студента она начинается с первых дней учебы в высшем учебном заведении. Это работа, которую за него никто не в состоянии выполнить и обязанность преподавателя – научить студента самостоятельно трудиться, самостоятельно пополнять запас знаний.

Для успешной самостоятельной работы студент должен планировать свое время и за основу рекомендуется брать рабочую программу учебной дисциплины.

Самостоятельная работа студента при подготовке и изучению лекционного материала.

После прослушивания лекции необходимо проработать и осмыслить полученный материал. Умение слушать, творчески воспринимать излагаемый материал – это необходимое условие для его понимания. Внимательное слушание требует умственного напряжения, волевых усилий. В процессе лекционного занятия необходимо выделять важные моменты, выводы, анализировать основные положения. Если при изложении материала преподавателем создана проблемная ситуация, пытаться предугадать дальнейший ход рассуждений. Это способствует лучшему усвоению материала лекции и облегчает запоминание отдельных выводов. Из сказанного следует, что для более прочного усвоения знаний лекцию необходимо конспектировать.

Конспект лекций должен быть в отдельной тетради. Не надо стремиться подробно слово в слово записывать всю лекцию. Конспектируйте только самое важное в рассматриваемом параграфе: формулировки определений и законов, выводы основных уравнений и формул, то, что старается выделить лектор, на чем акцентирует внимание студентов. Старайтесь отфильтровывать и сжимать подаваемый материал. Более подробно записывайте основную информацию и кратко – дополнительную. Не нужно просить лектора несколько раз повторять одну и ту же фразу для того, чтобы успеть записать. По возможности записи ведите своими словами, своими формулировками. Лекция не должна превращаться в своеобразный урок-диктант. Поскольку в этом случае вы не учитесь мыслить и анализировать услышанное и лекция превращается в механический процесс.

Тетрадь для конспекта лекций также требует особого внимания. Ее нужно сделать удобной, практичной и полезной, ведь именно она является основным информативным источником при подготовке к различным отчетным занятиям, зачетам, экзаменам. Целесообразно отделить поля, где можно бы изложить свои мысли, вопросы, появившиеся в ходе лекции. Полезно одну из страниц оставлять свободной. Она потребует потом, при самостоятельной подготовке. Сюда можно будет занести дополнительную информацию по данной теме, полученную из других источников: чертежи и рисунки, схемы и графики, цитаты и биографии выдающихся ученых и т.д. Таким образом, на лекции студент должен совместить два момента: внимательно слушать лектора, прикладывая максимум усилий для понимания излагаемого материала и одновременно вести его осмысленную запись.

Рабочей программой дисциплины предусматривается самостоятельное изучение определенных тем, приведенных в пункте 7.3, и их конспектирование. При составлении конспектов можно пользоваться теми же принципами, что при написании лектора. Не нужно полнотекстовое копирование, научитесь в процессе конспектирования разбивать текст на смысловые части и заменять их содержание короткими фразами и формулировками.

Самостоятельная работа по решению практических задач.

Практические занятия по решению задач существенно дополняют лекции по дисциплине. В процессе анализа и решения задач расширяются и углубляются знания, полученные из лекционного курса и учебников, глубже понимаются физические законы и формулы. В процессе решения задач вырабатываются навыки вычислений, работы со справочной литературой, таблицами. Решение задач не только способствует закреплению знаний и тренировке в применении изучаемых законов, но и формирует особый стиль умственной деятельности, особый метод подхода к физическим явлениям. Однако на практических занятиях не всегда можно охватить все типы задач.

Рабочей программой предусматривается решение домашних задач. Работы выполняются студентами самостоятельно и сдаются преподавателю к указанному сроку.

Несмотря на различие в видах задач, представленных в домашних задачах, их решение можно проводить по следующему общему плану (некоторые пункты плана могут выпадать в некоторых конкретных случаях):

1. Прочитать внимательно условие задачи;

2. Посмотреть, все ли термины в условиях задачи известны и понятны (если что-то неясно, следует обратиться к учебнику, просмотреть решения предыдущих задач, посоветоваться с преподавателем);
3. Записать в сокращенном виде условие задачи (когда введены стандартные обозначения, легче вспоминать формулы, связывающие соответствующие величины, четче видно, какие характеристики заданы, все ли они выражены в одной системе единиц и т.д.);
4. Сделать чертёж, если это необходимо (делая чертёж, нужно стараться представить ситуацию в наиболее общем виде, например, если решается задача о колебании маятника, его следует изобразить не в положении равновесия, а отклонённым);
5. Произвести анализ задачи, вскрыть её физический смысл (нужно четко понимать, в чем будет заключаться решение задачи; так, если требуется найти траекторию движения точки, то ответом должна служить запись уравнений кривой, описывающей эту траекторию; на вопрос, будет ли траектория замкнутой линией, следует ответить «да» или «нет» и объяснить, почему выбран такой ответ);
6. Установить, какие физические законы и соотношения могут быть использованы при решении данной задачи;
7. Составить уравнения, связывающие физические величины, которые характеризуют рассматриваемые явления с количественной стороны;
8. Решить эти уравнения относительно неизвестных величин, получить ответ в общем виде. Прежде чем переходить к численным значениям, полезно провести анализ этого решения: он поможет вскрыть такие свойства рассматриваемого явления, которые не видны в численном ответе;
9. Перевести количественные величины в общепринятую систему единиц (СИ), найти численный результат;
10. Проанализировать полученный ответ, выяснить как изменяется искомая величина при изменении других величин, функцией которых она является, исследовать предельные случаи.

Итак, для более глубокого усвоения материала полезно решать задачи. Умение решать задачи потребуется и на экзамене. Большинство вузов в билеты устного экзамена, помимо теоретических вопросов, включает одну или несколько задач, и во время экзамена вам, кроме дополнительных теоретических вопросов, может быть предложена задача. Экзаменаторы справедливо считают, что одним из критериев усвоения теории является способность решать задачи.

Самостоятельная работа студента при подготовке к контрольной работе, экзамену.

В высшей школе студент должен прежде всего сформировать потребность в знаниях и научиться учиться, приобрести навыки самостоятельной работы, необходимые для непрерывного самосовершенствования, развития профессиональных и интеллектуальных способностей.

К формам учета знаний по дисциплине кроме экзамена рабочей программой предусмотрена также контрольная работа. Контрольная работа согласно рабочей программе дисциплине выполняется в конце семестра по всем практическим темам семестра. В контрольной работе содержится четыре задачи. Контрольная работа направлена на проверку умений студентов применять полученные теоретические знания в отношении определенной конкретной задачи. При подготовке к контрольной работе рекомендуется еще раз просмотреть принципы решения задач рассматриваемых на практических занятиях.

Экзамен – форма заключительной проверки знаний, умений, навыков, степени развития обучающихся в системе образования; по своим целям бывают выпускными, завершающими определенный этап учебного процесса, вступительными.

В процессе подготовки экзамену при изучении того или иного физического закона, кроме формулировки и математической записи закона, следует обратить внимание на опыты, которые обнаруживают этот закон и подтверждают его справедливость, границы и условия

его применимости. Также полезно отметить, как этот закон используется на практике. То же самое можно сказать и об изучаемой теории в целом. Помимо основных понятий, положений, законов и принципов теории следует обратить внимание на опыты, благодаря которым была создана эта теория, эксперименты, подтверждающие ее справедливость. Вспомните, как используется данная теория на практике.

Основная цель подготовки экзамену — достичь понимания физических законов и явлений, а не только механически заучить материал. Но все же довольно много вещей придется просто выучить. При этом следует учитывать ваши индивидуальные особенности. К примеру, если у вас зрительный тип памяти, тогда следует уделить особое внимание внешней форме вашего краткого конспекта — недопустим небрежный, неразборчивый, мелкий почерк. Формулы должны быть отделены от текста некоторым пространством, чтобы «бросаться в глаза» сразу. Конечно, аккуратный конспект потребует несколько большего времени, но в итоге время на заучивание сократится, и вы эффективнее подготовитесь к экзамену. Если у вас слуховой тип памяти, следует проговаривать наиболее важную часть материала, возможно даже использовать магнитофон для подготовки. Если же преобладающим у вас является моторный тип памяти, то конспект нужно переписать несколько раз, причем каждый раз надо вычеркивать то, что вы уже выучили достаточно хорошо, оставляя для переписывания только самое необходимое для запоминания.

Экзамены дают возможность также выявить, умеют ли студенты использовать теоретические знания при решении физических задач. На экзамене оцениваются: понимание и степень усвоения теории; методическая подготовка; знание фактического материала; умение приложить теорию к практике, решать физические задачи, правильно проводить расчеты и т. д.; логика, структура и стиль ответа, умение защищать выдвигаемые положения.

Перечисленные формы учета знаний преследуют не только цели, указанные выше. Главная задача состоит в том, чтобы у студента в результате подготовки к коллоквиумам, зачетам и экзаменам из отдельных сведений и деталей составилось представление об общем содержании соответствующей дисциплины, стала понятной методика предмета, его система. Готовясь к экзамену, студент приводит в систему знания, полученные на лекциях, в лабораториях, на практических занятиях, разбирается в том, что осталось непонятным, и тогда изучаемая им дисциплина может быть воспринята в полном объеме с присущей ей строгостью и логичностью, ее практической направленностью.

4. Контроль знаний.

Контроль знаний, умений и навыков студентов по изучению дисциплины осуществляется на уровне текущего и итогового контроля.

4.1 Текущий контроль знаний

Текущий контроль успеваемости проводится с целью повышения качества и прочности знаний, проверки процесса и результатов усвоения учебного материала. Текущий контроль успеваемости проводится в течении семестра и предполагает вставление каждому студенту отметок, оценивающих выполнение им всех видов работ, предусмотренных учебной программой дисциплины.

Текущий контроль осуществляется при работе на лекциях, практических занятиях, при выполнении заданий для самостоятельной работы и выполнении контрольной работы. Образцы различных видов оценочных средств текущего контроля по дисциплине представлены ниже.

Примерный вариант контрольной работы

Вариант №1

1. Кристалл NaCl, коэффициент сжимаемости которого $K=3,47 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$, подвергли всестороннему сжатию, в результате чего его объем уменьшился на 1,0%. Найти:

- давление, под которым находится кристалл;
- приращение объемной плотности энергии связи кристалла.

2. Для двумерного кристалла число нормальных одной поляризации в интервале частот $(\omega, \omega+d\omega)$ определяется формулой:
$$dZ_{\omega} = \frac{S}{2\pi v^2} \omega d\omega,$$

где S – площадь кристалла, v – скорость распространения колебаний. Считая v не зависящей от ω , найти для плоской квадратной решетки из одинаковых атомов, содержащей n_0 атомов на единицу площади характеристическую температуру.

1. Решить уравнение распространения упругих волн бесконечно малой амплитуды если направление распространения $[100]$.

2. Показать, что средняя энергия $\bar{\varepsilon}$, приходящаяся на одну частицу при $0 \text{ }^{\circ}\text{K}$ для электронов, подчиняющихся статистике Ферми-Дирака, равна $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F(0)$, где $\varepsilon_F(0)$ – энергия Ферми при $T=0 \text{ }^{\circ}\text{K}$.

Полагая $\bar{\varepsilon}_F(T)$ (среднюю энергию электрона при конечной температуре) равной

$$\bar{\varepsilon}_F(T) = \frac{3}{5} \varepsilon_F(0) \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F(0)} \right) \right], \quad \text{найти величину отношения } \frac{(C_v)_{FD}}{(C_v)_{кл}} \text{ для}$$

электронного газа с энергией Ферми, равной 7 эВ. $(C_v)_{FD}$ – удельная теплоёмкость газа, состоящего из частиц, подчиняющихся статистике Ферми – Дирака, а $(C_v)_{кл}$ – удельная теплоёмкость газа, подчиняющегося классической статике.

4.2 Итоговый контроль знаний

К итоговой форме контроля, проводимой по данной дисциплине, является экзамен. Примерные экзаменационные вопросы представлены в пункте 7.4 рабочей программы дисциплины.

Экзамен – форма заключительной проверки знаний, умений, навыков, степени развития обучающихся по дисциплине.

Рекомендации по подготовке экзамену представлены в пункте 3.3 настоящего учебно-методического комплекса по дисциплине.

Примерный экзаменационный билет

Амурский государственный университет
Утверждаю
Зам.зав. кафедрой _____

«__» _____ 20__ г.

Факультет ИФ
ФКСВ
Экзамен 8 семестр

Билет № 1

1. Колебания атомов кристаллической решетки. Колебания атомов трехмерной решетки.
2. Свойства диэлектриков. Поляризация диэлектриков. Основные характеристики. Типы упругой поляризации.
3. Задача.

5. Интерактивные технологии и инновационные методы, используемые в образовательном процессе.

При преподавании дисциплины используется технология модульного обучения. Дисциплина разделена на 5 модулей, исходя из того, что модуль, его оптимальный объем логически соответствует завершеному разделу учебной дисциплины. При этом в соответствии с целевым назначением модули являются смешанными, т.е. соединяют в себе познавательные и операционные функции. В модуле излагается принципиально важное содержание учебной информации, дается разъяснение к этой информации, определяются условия погружения в информацию (с помощью средств ТСО, конкретных литературных источников, методов добывания информации), приводятся теоретические задания и рекомендации к ним, указаны практические задания.

Для достижения поставленной цели применяются объяснительно-иллюстративные, проблемные, поисковые, активные и интерактивные технологии.

При чтении лекций по данной дисциплине используется такой неимитационный метод активного обучения, как «Проблемная лекция». При проведении практических занятий используется либо «Мозговой штурм», который направленные на вовлечение всех студентов в решении конкретных задач.