

*Федеральное агентство по образованию*  
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ГОУВПО «АмГУ»

УТВЕРЖДАЮ

Зав.кафедрой ФМиЛТ

\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2007г.

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ПО ДИСЦИПЛИНЕ

для специальности 010701 – «Физика»

Составитель: И.В. Верхотурова

Благовещенск

2007 г.

Печатается по решению  
редакционно-издательского совета  
инженерно-физического факультета  
Амурского государственного  
университета

И.В. Верхотурова

Учебно-методический комплекс по дисциплине «Физика конденсированного состояния вещества» для студентов очной формы обучения специальности 010701 «Физика». - Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2007. – 166 с.

Учебно-методические рекомендации ориентированы на оказание помощи студентам очной формы обучения по специальности 010701 «Физика» для формирования специальных знаний по важнейшим понятиям и положениям современной физики конденсированного состояния вещества, что позволит им в дальнейшей самостоятельной работе по избранной специальности.

© Амурский государственный университет, 2007

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Рабочая программа дисциплины _____	4
2. Конспект лекций _____	14
3. График самостоятельной работы студента _____	135
4. Практические занятия _____	136
4.1 Общие рекомендации по решению задач _____	137
4.2 Задачи _____	138
5. Примерный вариант контрольной работы _____	152
6. Примерные задания для оценки качества знаний по дисциплине _____	153
7. Экзаменационные билеты _____	158

Федеральное агентство по образованию РФ  
Амурский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по УНР

Е.С. Астапова

\_\_\_\_\_ подпись, И.О.Ф

«\_\_» \_\_\_\_\_ 200\_\_ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по *Физике конденсированного состояния вещества*

для специальности *010701 - физика*

Курс 4

Семестр 8

Лекции 36 (час.)

Экзамен - 8 семестр

Практические (семинарские) занятия 18 (час.) Зачет -

Лабораторные занятия -

Самостоятельная работа 36 (час.)

Всего часов -90

Составитель д.ф.-м.н., проф. Астапова Е.С.

Факультет *инженерно - физический*

Кафедра *физического материаловедения и лазерных технологий*

2006 г.

Рабочая программа составлена на основании авторских разработок

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры физического материаловедения и лазерных технологий

«\_\_» \_\_\_\_\_ 200\_\_ г., протокол № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ д.ф.-м.н. Астапова Е.С.

Рабочая программа одобрена на заседании УМС \_\_\_\_\_  
(наименование специальности)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 200\_\_ г., протокол № \_\_\_\_\_

Председатель \_\_\_\_\_  
(подпись, И.О.Ф.)

Рабочая программа переутверждена на заседании кафедры от \_\_\_\_\_  
протокол № \_\_\_\_\_ .

Зав.кафедрой \_\_\_\_\_  
подпись \_\_\_\_\_ Ф.И.О. \_\_\_\_\_

СОГЛАСОВАНО  
Начальник УМУ

\_\_\_\_\_  
(подпись, И.О.Ф.)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 200\_\_ г.

СОГЛАСОВАНО  
Председатель УМС факультета

\_\_\_\_\_  
(подпись, И.О.Ф.)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 200\_\_ г.

СОГЛАСОВАНО  
Заведующий выпускающей кафедрой

\_\_\_\_\_  
(подпись, И.О.Ф.)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 200\_\_ г.

## **ФЕДЕРАЛЬНЫЙ КОМПОНЕНТ**

Азбука кристаллографии (основные идеи, исходные положения и определения), строение конденсированных сред, кристаллическая структура и ее описание, симметрия кристалла, точечные и пространственные (федоровские) группы, дифракция и 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, энгармонизм. Электронные свойства - магнитные, электрические, оптические гальвано-магнитные, сверхпроводящие.

## **ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА**

Цель курса - изучение теоретических основ физики конденсированного состояния, их практического применения.

Преподавание курса связано с другими курсами государственного образовательного стандарта: «Кристаллография», «Кристаллофизика», «Теория упругости», «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Векторная алгебра», «Аналитическая геометрия», «Дифференциальная геометрия», «Электродинамика», «Классическая динамика» и др.

По завершению обучения по дисциплине студент должен:

- овладеть системой знаний по физике конденсированного состояния,
- овладеть основами геометрической кристаллографии, микро- и макрокристаллографии,
- уметь решать задачи с использованием приобретенных теоретических навыков.

## **СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

## ЛЕКЦИОННЫЙ КУРС

1. Предмет физики конденсированного состояния. Основные понятия. Краткие исторические сведения. Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок (2 час.)
2. Межатомное взаимодействие. Основные типы связей в твердых телах. Классификация твердых тел. Энергия связи. Молекулярные, ионные, ковалентные, металлические кристаллы. (2 час.)
3. Дефекты в твердых телах. Классификация дефектов. Тепловые точечные дефекты. Равновесная концентрация точечных дефектов. Радиационные дефекты. Дислокации. Контур и вектор Бюргерса. Энергия дислокаций. (2 час.)
4. 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. (2 час.)
5. Колебания атомов кристаллической решетки. Одномерные колебания однородной струны. Упругие волны в монокристаллах. Колебания одноатомной линейной цепочки. Колебания одномерной решетки с базисом. Колебания атомов трехмерной решетки. (2 час.)
6. Тепловые свойства твердых тел. Теплоемкость твердых тел. Закон Дюлонга-Пти. Теория теплоемкости Эйнштейна. Теория теплоемкости Дебая. Теплоемкость металлов. Учет вклада свободных электронов. (2 час.)
7. Тепловое расширение твердых тел. Теплопроводность твердых тел. Теплопроводность, обусловленная атомными колебаниями. Теплопроводность металлов. Учет вклада свободных электронов. Диффузия в твердых телах. (2 час.)
8. Классификация твердых тел по величине электропроводности. Уравнение Шредингера для твердого тела. Одноэлектронное приближение. Функции Блоха. (2 час.)
9. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зоны Брюллиэна. Поверхность Ферми. Энергетический спектр электронов в кристалле. Модель Кронига-Пенни. (2 час.)
10. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники. Эффективная масса электрона. Энергетические уровни примесных атомов в кристалле. (2 час.)
11. Электрические свойства твердых тел. Основные свойства металлов. Электропроводность металлов. Собственная проводимость полупроводников. Проводимость примесных полупроводников. Электропроводность диэлектриков. Свойства твердых тел. в сильных электрических полях. Эффект Холла. (2 час.)
12. Свойства диэлектриков. Поляризация диэлектриков. Основные характеристики.

Электронная упругая поляризация. Ионная упругая поляризация. Дипольная упругая поляризация. Особенности тепловой поляризации. Связь между диэлектрической проницаемостью и поляризуемостью. (2 час.)

13. Магнитные свойства твердых тел. Классификация магнетиков. Природа диамагнетизма. Природа парамагнетизма. Диамагнетизм и парамагнетизм твердых тел. (2 час.)

14. Ферромагнетизм. Молекулярное поле Вейсса. Опыт Дорфмана. Обменное взаимодействие и его роль в возникновении ферромагнетизма. Спиновые волны. Антиферромагнетизм и ферримагнетизм. Ферромагнитные домены. Магнитный резонанс. (2 час.)

15. Сверхпроводимость. Нулевое сопротивление. Температура сверхпроводящего перехода. Идеальный диамагнетизм. Критическое магнитное поле. Кристаллическая структура и изотопический эффект. Электронный вклад в теплоемкость. Поглощение электромагнитного излучения. Квантование магнитного потока. (2 час.)

16. Эффекты Джозефсона. Высокотемпературная сверхпроводимость. Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов. Теория Гинзбурга-Ландау. Притяжение между электронами. Куперовские пары. Теория Бардина-Купера-Шриффера. (2 час.)

17. Оптические свойства твердых тел. Виды взаимодействия света с твердым телом. Оптические константы. Поглощение света кристаллами. Рекомбинационное излучение в полупроводниках. Спонтанное и индуцированное излучение. Твердотельные лазеры. (2 час.)

18. Физические свойства аморфных твердых тел. Структура аморфных твердых тел. Энергетический спектр некристаллических твердых тел. Аморфные полупроводники. Применение аморфных полупроводников. Аморфные диэлектрики. Аморфные металлы. (2 час.)

## **ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ**

1. Химические связи и энергия решетки. (2 ч.)
2. Дефекты в кристаллах. (2 ч.)
3. Упругость кристаллов. Тепловые свойства кристаллической решетки. (2 ч.)
4. Энергетическая зонная структура. (2 ч.)
5. Электронная теория металлов (2 ч.)
6. Свойства однородных полупроводников. Диэлектрики. (2 ч.)
7. Диамагнетизм и парамагнетизм. Ферромагнетизм, антиферромагнетизм. (2 ч.)
8. Оптические свойства твердых тел. (2 ч.)
9. Контрольная работа. (2 ч.)

### **ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ**

не предусмотрены.

### **САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ**

1. Обзор литературы по определенной теме, составление доклада.
2. Подготовка к каждой лекции по теоретическим вопросам, получаемым в конце предыдущей лекции (2-3 вопроса).
3. Выполнение заданий по курсу к каждому практическому занятию (3-5 задач).
4. Подготовка к экзамену.
5. Реферативные работы по механическим свойствам твердых тел, тепловым, электрическим, оптическим, магнитным свойствам.

## ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

1. Предмет физики конденсированного состояния. Основные понятия. Краткие исторические сведения. Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок
2. Межатомное взаимодействие. Основные типы связей в твердых телах. Классификация твердых тел.
3. Энергия связи. Молекулярные, ионные, ковалентные, металлические кристаллы.
4. Дефекты в твердых телах. Классификация дефектов. Тепловые точечные дефекты. Равновесная концентрация точечных дефектов. Радиационные дефекты.
5. Дислокации. Контур и вектор Бюргерса. Энергия дислокаций.
6. Механические свойства твердых тел. Напряженное и деформированное состояние твердых тел.
7. Упругость. Закон Гука для изотропных и анизотропных твердых тел. Тензоры напряжений и деформаций, обобщенный закон Гука.
8. Пластические свойства кристаллических твердых тел. Хрупкое разрушение.
9. Колебания атомов кристаллической решетки. Одномерные колебания однородной струны. Упругие волны в монокристаллах.
10. Колебания одноатомной линейной цепочки. Колебания одномерной решетки с базисом. Колебания атомов трехмерной решетки.
11. Тепловые свойства твердых тел. Теплоемкость твердых тел. Закон Дюлонга-Пти. Теория теплоемкости Эйнштейна. Теория теплоемкости Дебая. Теплоемкость металлов. Учет вклада свободных электронов.
12. Тепловое расширение твердых тел. Теплопроводность твердых тел. Теплопроводность, обусловленная атомными колебаниями.
13. Теплопроводность металлов. Учет вклада свободных электронов. Диффузия в твердых телах.
14. Классификация твердых тел по величине электропроводности. Уравнение Шредингера для твердого тела. Одноэлектронное приближение. Функции Блоха.
15. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зоны Брюллиэна. Поверхность Ферми.
16. Энергетический спектр электронов в кристалле. Модель Кронига-Пенни.
17. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники. Эффективная масса электрона. Энергетические уровни примесных атомов в кристалле.
18. Электрические свойства твердых тел. Основные свойства металлов. Электропроводность металлов.

19. Собственная проводимость полупроводников. Проводимость примесных полупроводников. Электропроводность диэлектриков. Свойства твердых тел. в сильных электрических полях. Эффект Холла.
20. Свойства диэлектриков. Поляризация диэлектриков. Основные характеристики. Электронная упругая поляризация. Ионная упругая поляризация.
21. Дипольная упругая поляризация. Особенности тепловой поляризации. Связь между диэлектрической проницаемостью и поляризуемостью.
22. Магнитные свойства твердых тел. Классификация магнетиков. Природа диамагнетизма. Природа парамагнетизма. Диамагнетизм и парамагнетизм твердых тел.
23. Ферромагнетизм. Молекулярное поле Вейсса. Опыт Дорфмана. Обменное взаимодействие и его роль в возникновении ферромагнетизма. Спиновые волны. Антиферромагнетизм и ферримагнетизм. Ферромагнитные домены. Магнитный резонанс.
24. Сверхпроводимость. Нулевое сопротивление. Температура сверхпроводящего перехода. Идеальный диамагнетизм. Критическое магнитное поле.
25. Кристаллическая структура и изотопический эффект. Электронный вклад в теплоемкость. Поглощение электромагнитного излучения. Квантование магнитного потока.
26. Эффекты Джозефсона. Высокотемпературная сверхпроводимость. Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов. Теория Гинзбурга-Ландау. Притяжение между электронами. Куперовские пары. Теория Бардина-Купера-Шриффера.
27. Оптические свойства твердых тел. Виды взаимодействия света с твердым телом. Оптические константы. Поглощение света кристаллами. Рекомбинационное излучение в полупроводниках.
28. Спонтанное и индуцированное излучение. Твердотельные лазеры.
29. Физические свойства аморфных твердых тел. Структура аморфных твердых тел.
30. Энергетический спектр некристаллических твердых тел. Аморфные полупроводники.
31. Применение аморфных полупроводников. Аморфные диэлектрики. Аморфные металлы.

## РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

### Основная

1. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 2000.
2. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: В 10 т: учеб. пособие. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2: Теория конденсированного состояния/ под. Ред Л.П. Питаевского. 2004.
3. Физика твердого тела: Лаб. практикум [В 2 т]: Учеб. Пособие/ под. Ред. Хохлов А.Ф. 2001.

### Дополнительная

4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Гос. изд-во тех.-теор.лит., 1989.
5. Дж.Блейкмор. Физика твердого тела. М.: Мир, 1988. 608 с.
6. Г.Дж.Голдсמיד Задачи по физике твердого тела. М.: Наука, 1982.

## **Критерии оценки при сдаче экзамена**

1. К сдаче экзамена допускаются студенты:

- посетившие все лекционные, практические занятия данного курса;
- выполнившие итоговую контрольную работу на положительную оценку.

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, правильно решенной задачи.

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

Оценка «удовлетворительно» - ставится 50 - 70 % правильных ответов на экзамене, правильно решенной задачи.

«неудовлетворительно» - ставится до 50 % правильных ответов на экзамене, не правильно решенной задачи.

## 2. КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

### Введение (2 час.)

1. Предмет физики конденсированного состояния.
2. Основные понятия. Краткие исторические сведения.
3. Азбука кристаллографии (основные идеи, исходные положения и определения). Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок. Симметрия кристалла, точечные и пространственные (федоровские) группы.

### Тема 1. Кристаллическая решетка (2 час.)

1. Межатомное взаимодействие.
2. Основные типы связей в твердых телах.
3. Классификация твердых тел. Энергия связи. Молекулярные, ионные, ковалентные, металлические кристаллы.

### Тема 2. Дефекты кристаллической решетки (2 час.)

1. Дефекты в твердых телах. Классификация дефектов. Тепловые точечные дефекты. Радиационные дефекты.
2. Равновесная концентрация точечных дефектов.
3. Дислокации. Контур и вектор Бюргера. Энергия дислокаций.

### Тема 3. Тепловые свойства кристаллов (6 час.)

1. Колебания атомов кристаллической решетки. Одномерные колебания однородной струны. Упругие волны в монокристаллах. Колебания одноатомной линейной цепочки. Колебания атомов трехмерной решетки.
2. Тепловые свойства твердых тел. Теплоемкость твердых тел. Закон Дюлонга-Пти. Теория теплоемкости Эйнштейна. Теория теплоемкости Дебая. Теплоемкость металлов. Учет вклада свободных электронов.
3. Тепловое расширение твердых тел. Теплопроводность твердых тел. Теплопроводность, обусловленная атомными колебаниями. Теплопроводность металлов. Учет вклада свободных электронов. Диффузия в твердых телах.

### Тема 4. Электрические свойства кристаллов (10 час.)

1. Классификация твердых тел по величине электропроводности. Уравнение Шредингера для твердого тела. Одноэлектронное приближение. Функции Блоха.
2. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зоны Брюллиэна. Поверхность Ферми. Энергетический спектр электронов в кристалле. Модель Кронига-Пенни.
3. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники. Эффективная масса электрона. Энергетические уровни примесных атомов в кристалле.

4. Электрические свойства твердых тел. Основные свойства металлов. Электропроводность металлов. Собственная проводимость полупроводников. Проводимость примесных полупроводников. Электропроводность диэлектриков. Свойства твердых тел. в сильных электрических полях. Эффект Холла.

5. Свойства диэлектриков. Поляризация диэлектриков. Основные характеристики. Электронная упругая поляризация. Ионная упругая поляризация. Дипольная упругая поляризация. Особенности тепловой поляризации. Связь между диэлектрической проницаемостью и поляризуемостью.

#### Тема 5. Магнитные свойства твердых тел (10 час.)

1. Магнитные свойства твердых тел. Классификация магнетиков. Природа диамагнетизма. Природа парамагнетизма. Диамагнетизм и парамагнетизм твердых тел.

2. Ферромагнетизм. Молекулярное поле Вейсса. Опыт Дорфмана. Обменное взаимодействие и его роль в возникновении ферромагнетизма. Спиновые волны. Антиферромагнетизм и ферримагнетизм. Ферромагнитные домены. Магнитный резонанс.

3. Сверхпроводимость. Нулевое сопротивление. Температура сверхпроводящего перехода. Идеальный диамагнетизм. Критическое магнитное поле. Кристаллическая структура и изотопический эффект. Электронный вклад в теплоемкость. Поглощение электромагнитного излучения. Квантование магнитного потока.

4. Эффекты Джозефсона. Высокотемпературная сверхпроводимость. Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов. Теория Гинзбурга-Ландау. Притяжение между электронами. Куперовские пары. Теория Бардина-Купера-Шриффера.

#### Тема 6. Оптические явления (2 час.)

1. Оптические свойства твердых тел. Виды взаимодействия света с твердым телом.

Оптические константы. Поглощение света кристаллами.

2. Рекомбинационное излучение в полупроводниках.

3. Спонтанное и индуцированное излучение. Лазеры.

#### Тема 7. Аморфные свойства твердых тел (2 час.)

1. Физические свойства аморфных твердых тел. Структура аморфных твердых тел.

2. Энергетический спектр некристаллических твердых тел.

3. Аморфные полупроводники. Применение аморфных полупроводников.

4. Аморфные диэлектрики. Аморфные металлы.

## Тема 1. Кристаллическая решетка

Главной отличительной особенностью кристаллических твердых тел является периодическое расположение в пространстве их атомов, образующих пространственную трехмерную кристаллическую решетку. С периодическим расположением атомов связана и естественная огранка кристаллов. Анизотропное расположение атомов в кристаллической решетке объясняет анизотропию многих физических свойств твердых тел широко используемую в технике. Тепловые свойства кристалла вытекают из анализа колебаний его кристаллической решетки. Рассмотрение движения электронов в периодическом потенциале кристаллической решетки объясняет электрические свойства кристаллов. На атомах кристаллической решетки наблюдается дифракция всех частиц, движущихся внутри кристалла или попавших в него извне: электронов, фотонов, нейтронов. Дифракцией движущихся в кристалле электронов объясняют особенности расположения энергетических уровней электронов в кристалле. Дифракция пучков электронов, фотонов, нейтронов на кристаллической решетке дает самые информативные способы изучения структуры твердых тел. И наконец, нарушения — дефекты кристаллической решетки очень сильно влияют на все физические свойства твердых тел.

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.

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*. Однако часто выбирают элементарную ячейку большего объема, но более простой формы, содержащую несколько наборов атомов, формирующих базис элементарной ячейки. На рис. 1.1 изображена кристаллическая решетка  $\alpha$ -железа. Проще всего ее представить как пространство, заполненное кубиками, в углах (1) и в центре (2) которых расположены атомы железа. Такую

очень распространенную решетку принято называть объемно-центрированной кубической (ОЦК). Элементарную ячейку можно выбрать как косоугольный параллелепипед (б) с квадратным основанием. Однако за элементарную удобнее выбрать ячейку в 2 раза большего объема, но со всеми прямыми углами (а), она гораздо нагляднее, лучше отражает симметричность в расположении атомов, ее легче анализировать математически.

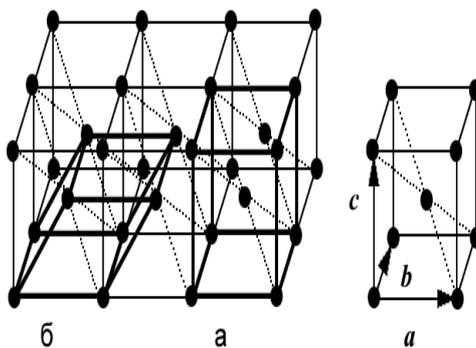


Рис. 1.1.

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. Можно сказать, что для полного описания структуры кристалла достаточно задать: 1) пространственную решетку, получаемую путем параллельных переносов на все векторы  $\vec{T}$  одной точки и 2) базис.

Пространственную решетку обычно характеризуют тремя векторами  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , задав их длины  $a, b, c$  называемые периодами кристаллической решетки и углы  $\alpha, \beta, \gamma$  между ними; именно эти параметры обязательно содержатся во всех справочниках по структуре веществ [2,3].

Базис принято задавать, описав положения всех атомов в одной ячейке набором радиус-векторов  $\vec{r}_i = x_i \vec{a} + y_i \vec{b} + z_i \vec{c}$ , числа  $x_i, y_i, z_i$  задают положения атомов в долях соответственно векторов  $\vec{a}; \vec{b}; \vec{c}$ .

Число атомов в базисе удобно подсчитывать, просуммировав все атомы, отсеченные гранями ячейки и оказавшиеся внутри ячейки, складывая также и "половинки", "четвертинки" и "восьмушки" попавших внутрь атомов. В случае ячейки на рис. 1.1(б) внутрь ячейки попадает 8 восьмушек "угловых" атомов, считают, что такой базис состоит из 1 атома с координатами  $0;0;0$ . Заметим, что в кристаллографии координаты атомов не заключают в круглые скобки, поскольку, как увидим далее, круглыми скобками принято обозначать кристаллические плоскости. В случае же ОЦК решетки (см. рис. 1.1 (а)) внутрь ячейки попадает один центральный и 8 восьмушек "угловых" атомов, то есть базис состоит из двух атомов: один занимает положение 1 с координатами  $0;0;0$ , а второй -  $1/2;1/2;1/2$ .

Симметрия кристаллических решеток. 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 имеют 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*).

Кубическая решетка (рис. 1.2) имеет три плоскости симметрии, параллельные граням, шесть диагональных плоскостей симметрии, перпендикулярных диагоналям граней, три оси четвертого порядка, шесть осей второго порядка, четыре оси третьего порядка и центр симметрии в центре куба. Существует строгая математическая теория групп, которая описывает в частности допустимые наборы операций симметрии кристаллической решетки [4].

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.

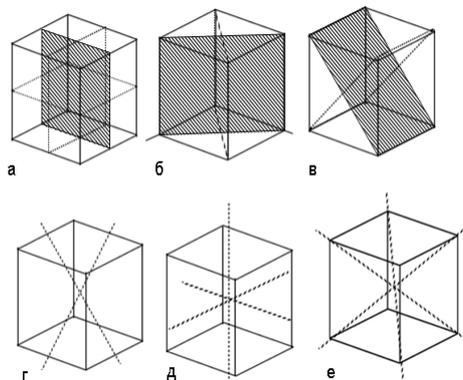


Рис. 1.2.

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.

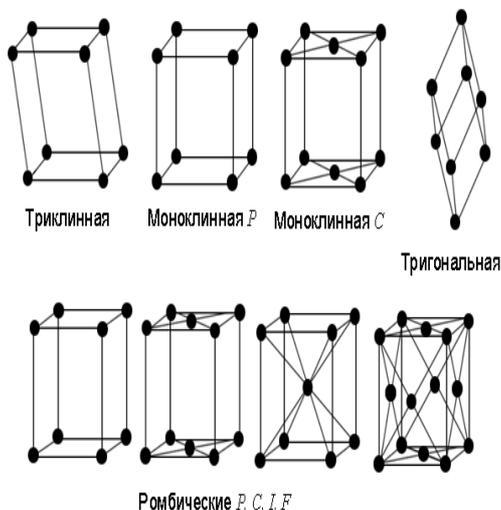


Рис. 1.3а.

Решетки Браве.

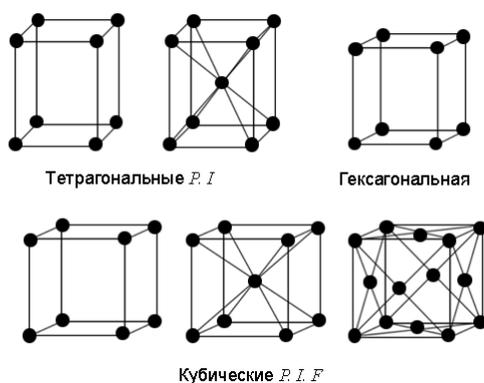


Рис. 1.3б.

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.

Все другие "типы" решеток которые, казалось бы должны существовать, например изображенная на рис. 1.1 решетка "б" с квадратом в основании, могут быть сведены выбором других векторов  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  к одному из указанных выше типов.

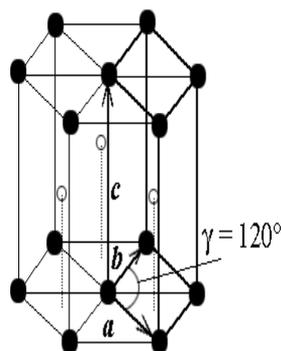


Рис. 1.4а.

*Элементарные ячейки гексагональной решетки.*

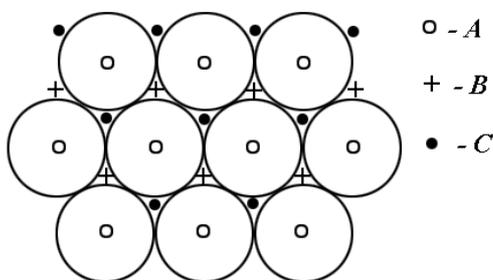


Рис. 1.4б.

*Варианты расположения атомов в плотноупакованных структурах (б).*

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. Можно легко показать, например, что в случае примитивных кубической, тетрагональной и ромбической решеток ячейка Вигнера-Зейца по форме и размерам совпадает с элементарной ячейкой, а ее центр совпадает с узлом решетки. В случае ОЦК и ГЦК решеток ячейка Вигнера-Зейца имеет более сложную форму [1].

Направление в кристаллической решетке. *Направление в кристаллической решетке* задают координатами их направляющего вектора в базисных векторах  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , обычно их заключают в квадратные скобки. При этом знак минуса в случае отрицательности координаты изображают над числом. Наиболее важные направления задаются как правило целыми числами. На рис. 1.2 направление  $[100]$  параллельно ребру куба, направление  $[111]$  параллельно пространственной диагонали куба, а направления  $[\bar{1}10]$  и  $[110]$  - диагоналям его нижнего основания. Некоторые направления в силу симметричности решетки, например кубической, физически равноценны, например  $[110]$ ,  $[101]$ ,  $[011]$  и  $[\bar{1}10]$ . Для описания такого семейства направлений используют треугольные скобки  $\langle 110 \rangle$ .

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  $(hkl)$ . На рис. 1.6 показаны плоскости  $(100)$ ,  $(200)$ ,  $(\bar{1}10)$ ,  $(110)$ ,  $(111)$ . Заметим, что параллельно изображенной на рис. 1.5 плоскости можно провести много параллельных плоскостей проходящих через узлы кристаллической решетки, откладывая по осям отрезки с длинами  $na/h, nb/k, nc/l$  ( $n$  - целое число) расстояние между такими ближайшими плоскостями называется

межплоскостным расстоянием  $d_{hkl}$  системы плоскостей  $(hkl)$ . Величину  $d_{hkl}$  удобно вычислять как расстояние от точки  $(000)$  до ближайшей к ней плоскости  $(hkl)$  (см. рис. 1.5). В кристаллах с кубической ячейкой индексы Миллера плоскости совпадают с координатами направления вектора нормали к ней, в случае других ячеек это как правило не так.

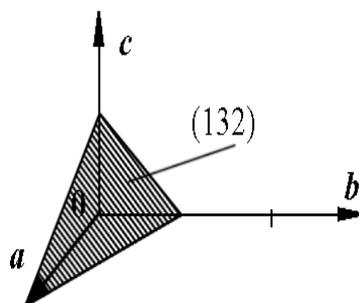


Рис. 1.5.

*Геометрический смысл индексов Миллера плоскости в кристалле.*

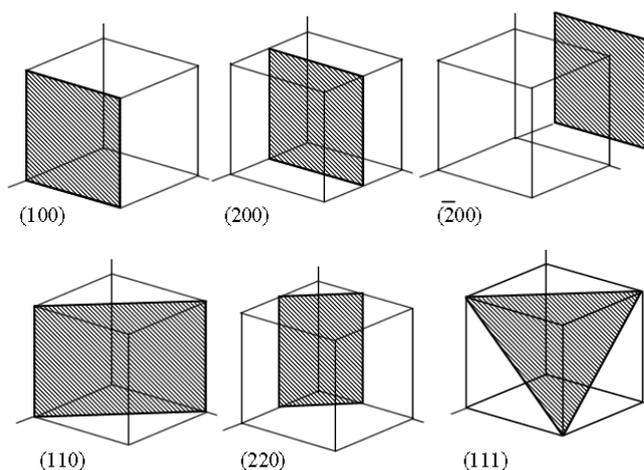


Рис. 1.6.

*Некоторые кристаллографические плоскости кубической решетки.*

В настоящее время известны тысячи кристаллических веществ, это и сравнительно простые металлы и их сплавы и кристаллы со сложной структурой, уникальные свойства которых обусловлены особым расположением большого числа атомов. Между тем состоят все эти кристаллы всего из нескольких десятков сортов атомов, но по-разному расположенных относительно друг друга. Известно, что электромагнитное взаимодействие между атомами заставляет атомы объединяться и формировать разные типы кристаллической решетки. В этом процессе главную роль играет электростатическая энергия взаимодействия зарядов, а в некоторых случаях и энергия магнитного взаимодействия, хотя вклад ее много меньше. Как перечисленные взаимодействия, так и атомные оболочки обладают определенной "симметричностью" и поэтому атомы объединяются как правило в

весьма симметричные структуры, главные из которых были рассмотрены в предыдущем разделе. По этой же причине разные, но близкие по характеристикам атомы, формируют кристаллические решетки, в которых атомы расположены идентично. Знание этих общих закономерностей построения кристаллов позволяет часто предсказывать новые структуры и материалы или улучшать физические свойства уже существующих материалов.

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. В кристаллах  $CsCl$  каждый ион окружен восемью ионами противоположного знака, расположенными симметрично и на расстоянии  $a\sqrt{3}/2$  от него; далее на расстоянии  $a$  располагаются 6 ионов того же знака, что и рассматриваемый, и так далее. В кристаллах  $NaCl$  у каждого иона - шесть ближайших соседей - ионов противоположного знака на расстоянии  $a/2$ , далее на расстоянии  $a\sqrt{2}$  располагаются 12 ионов того же знака и так далее. Видна тенденция, что ближе к выбранному иону оказываются ионы противоположного знака. Такое расположение дает выигрыш в электростатической энергии по сравнению с ионами, удаленными друг от друга.

Рассчитаем выигрыш в электростатической энергии и связанную с ним энергию связи ионов в кристалле. В таких расчетах рассматривают потенциальную энергию парного взаимодействия двух ионов с зарядами  $q_1$  и  $q_2$ , расположенными на расстоянии  $r$  друг от друга:

$$W(r) = q_1 q_2 / (4\pi\epsilon_0 r) + C / r^{12} \quad (1.1)$$

Первое слагаемое описывает энергию кулоновского притяжения или отталкивания ионов, а второй - весьма точно описывает отталкивание ионов из-за перекрытия их электронных облаков. Параметр  $C$  подбирают по результатам сопоставления результатов расчетов с экспериментальными данными. Типичный вид функции  $W(r)$  и обоих ее слагаемых представлен на рис. 10.

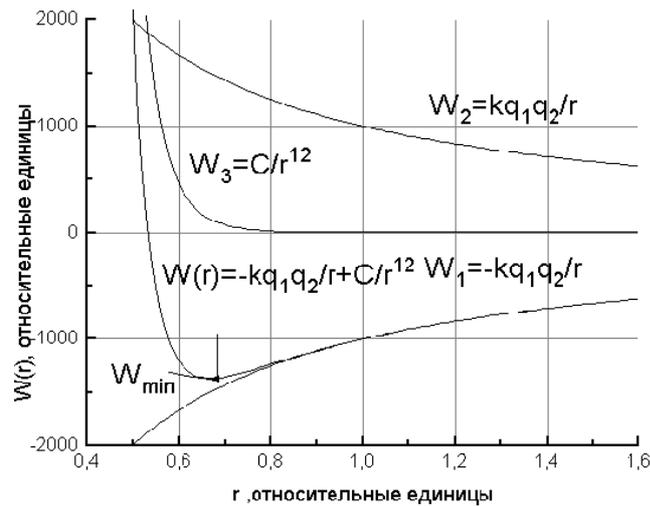


Рис. 1.10.

Зависимость энергии взаимодействия двух ионов  $W(r)$  от расстояния  $r$  между ними.

Далее выбирают один из ионов и суммируют энергии парного взаимодействия выбранного иона и ближайших соседей, более удаленных соседей и так далее. При расчете считают кристалл очень большим и пренебрегают поверхностными эффектами. Вычисленная сумма даст энергию связи выбранного иона в кристалле. Далее, можно найти минимум этой энергии как функции параметра решетки  $a$  и предсказать равновесное значение  $a$  как точку минимума энергии. Также можно вычислить вторую производную вычисленной энергии по  $a$  и предсказать величину связанного с ней объемного модуля упругости  $B = -V(dp / dV)$ .

Ионные кристаллы как правило имеют сравнительно простые, сильно упакованные и высокосимметричные, например кубические, кристаллические решетки. Эти кристаллы как правило хрупкие.

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.

Кристаллические решетки ковалентных кристаллов и их базисы могут быть весьма сложными и малосимметричными, поскольку формирование кристалла обусловлено ковалентными связями со всевозможной ориентацией между атомами или частями молекул. При рассмотрении ковалентных кристаллов часто пользуются понятиями "*ковалентный радиус атома*", "*длина ковалентной связи*" между атомами определенного сорта, углы между связями, поскольку эти величины сравнительно мало меняются в случаях различного окружения этих атомов в кристалле.

Между рассмотренными типами ковалентных и ионных кристаллов имеется много промежуточных типов кристаллов, связь в которых как правило ковалентная полярная. В такой связи сгусток электронной плотности ковалентной связи смещен к одному из ионов, из-за чего появляется дополнительная кулоновская энергия взаимодействия слегка заряженных атомов. Ионная связь как правило появляется между атомами с почти заполненными электронными оболочками (щелочные металлы, элементы первой и седьмой, реже второй и шестой групп таблицы Менделеева). Элементы третьей - пятой групп как правило образуют ковалентные связи. В некоторых случаях удается экспериментально (рассмотренными в следующем разделе дифракционными методами) определить среднее число электронов у атомов в кристаллической решетке и тем самым сделать вывод о заряде атомов и о характере связи в кристалле.

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. Расчеты энергии связи в металлах достаточно сложны и в данной книге не рассматриваются. Как правило металлы образуют одну из плотноупакованных кристаллических решеток (ГПУ, ГЦК) или ОЦК.

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 (см. рис. 11). При этом за счет кулоновского притяжения отрицательных ионов к иону водорода образуется сравнительно непрочная связь с энергией порядка 0,1 эВ. Малость иона водорода позволяет последнему связать только два атома.

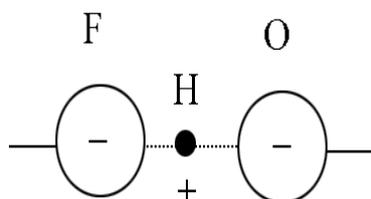


Рис. 1.11.

Схема образования водородной связи.

Водородная связь играет важную роль в биологических молекулах и кристаллах. Например соединение двух спиралей ДНК обусловлено водородными связями. Сегнетоэлектрические свойства некоторых кристаллов и поведение молекул воды и льда при температуре около 0°С объясняют существованием водородных связей в них [1].

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.

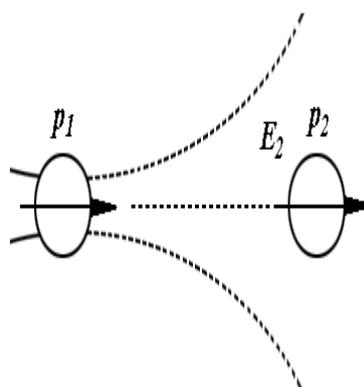


Рис. 1.12.

Схема образования диполь-дипольной связи.

Понять происхождение этой связи можно с помощью простой классической модели, рассмотрев взаимодействие двух нейтральных атомов, находящихся на расстоянии  $r$  друг от друга (см. рис. 12). Центр отрицательного заряда в каждый момент времени не совпадает с центром положительного ядра атома. Поэтому атом 1 обладает ненулевым мгновенным

значением дипольного момента  $P_1$ . Этот дипольный момент создает электрическое поле  $E$  вблизи атома 2 с модулем

$$E_2 = \text{const} \cdot p_1 / r^3. \quad (1.2)$$

Это поле поляризует второй атом в результате у него наводится дипольный момент:

$$p_2 = \beta \epsilon_0 E_2 = \beta \epsilon_0 \text{const} \cdot p_1 / r^3, \quad (1.3)$$

где  $\beta$  - поляризуемость атома. Энергия взаимодействия двух диполей пропорциональна  $p_1 p_2 / r^3$ . Тогда энергия взаимодействия двух атомов оказывается пропорциональной  $1 / r^6$ , она имеет малую величину, быстро убывает с расстоянием и проявляется вследствие этого на малых расстояниях. Как и в случае ионных кристаллов можно записать (см. задачу 1.3) энергию взаимодействия двух атомов, добавив к энергии взаимодействия пропорциональной  $1 / r^6$  энергию отталкивания атомов пропорциональную  $1 / r^{12}$  и вычислить энергию образования кристаллической решетки, параметр решетки и модуль упругости. Результаты таких расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

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 [1], то возможно получение монокристаллов или из раствора, или из расплава вещества.

Использование монокристаллических веществ и деталей из них в отдельных случаях является принципиально необходимым, например для изготовления поляризаторов оптического излучения или монохроматоров рентгеновского излучения. В ряде случаев использование монокристаллических веществ значительно улучшает характеристики сделанной из него детали. Примеры такого использования рассмотрены в последующих главах.

## Список литературы к теме 1

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука, 1978, 790 с.
2. Шаскольская М.П. Кристаллография. М.: Высшая школа. 1976. 392
4. Васильев Д.М. Физическая кристаллография. М.: Металлургия 1981. 248 с.
5. Вайнштейн Б.К. Симметрия кристаллов. - М.: Наука, 1979, 384 с.

## Тема 2. Дефекты кристаллической решетки

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.

Многие физические свойства кристаллов сильно зависят от дефектов разных групп. Например, прочность и пластичность материала сильнее всего зависят от линейных, поверхностных и объемных дефектов. Электросопротивление в основном зависит от точечных дефектов. Коэффициент диффузии, теплопроводность, окраска кристаллов также сильно зависят от наличия дефектов.

*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). Рассмотрим различные точечные дефекты, схематически изображенные на рис. 2.1.

Вакансия. Атом может отсутствовать в некотором узле кристаллической решетки (см. рис. 2.1 (1)). 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* (см. рис. 2.1 (2)), такой дефект называют *междоузельным атомом*. Появляется междоузельный атом, как и вакансии, часто при кристаллизации - случайно один из атомов в результате теплового движения попадет в промежутки 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 вакансии 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 быстро движущейся 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.

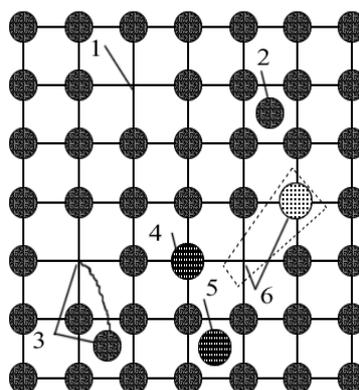


Рис. 2.1.

Типы точечных дефектов: 1 - вакансия; 2 - междоузельный 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. Вероятность образования точечного дефекта вычисляется по формуле Больцмана:

$$P = N_d / N_{\text{ат}} = \exp(-E_v / kT) \quad (2.1)$$

Вероятность  $P$ , вычисленная по этой формуле при  $E_v = 1 \text{ эВ}$  и  $T = 1000^\circ \text{ K}$ , окажется равной  $P = N_d / N_{\text{ат}} \approx \exp(-12) \approx 10^{-5}$ . При более низких температурах плотность дефектов убывает экспоненциально и оказывается очень малой величиной при температурах ниже комнатной. Однако и при низких температурах плотность дефектов может оказаться высокой, если кристалл, нагретый до высокой температуры, быстро охладить (закалить). Тогда плотность дефектов будет соответствовать высокой температуре.

В случае дефекта по Френкелю, для образования пары дефектов (вакансии и межузельного атома) потребуется энергия  $E_{\text{Фр}}$ , численно равная энергии необходимой для удаления атома на поверхность кристалла, а затем для перемещения атома с поверхности кристалла в междоузлие. Можно показать, что число таких дефектов вычисляется по формуле:

$$N_{\text{Фр}} = (N_A N_M)^{1/2} \exp(-E_{\text{Фр}} / 2kT) \quad (2.2)$$

где  $N_A$  и  $N_M$  соответственно число узлов и междоузлий в кристалле.

С повышением температуры равновесное количество дефектов возрастает, и на их образование требуется дополнительная энергия. Поэтому в некоторых кристаллах вблизи температуры плавления, когда при нагреве намного увеличивается число дефектов, наблюдается эффект увеличения теплоемкости, сопоставимый с типичными значениями молярной теплоемкости, связанной с колебаниями кристаллической решетки.

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. 2.3. Два или четыре атома могут поменяться местами (см. рис. 2.3 (1, 2)). Однако атому гораздо легче (это показывают как наглядные соображения о том, как "легче протиснуться атому между другими, раздвигая их", так и строгие расчеты) перескакивать в вакансию (см. рис. 2.3 (3)). Также сравнительно легко перескакивать межузельному атому, особенно если он небольшого размера (см. рис. 2.3 (4)). Поэтому основными механизмами диффузии в твердых телах считают вакансионный, связанный с перегруппировками атомов вблизи вакансий (см. рис. 2.3 (3)) и межузельный,

связанный с перемещениями, как правило, сравнительно мелких атомов по междоузлиям (см. рис. 2.3 (4)).

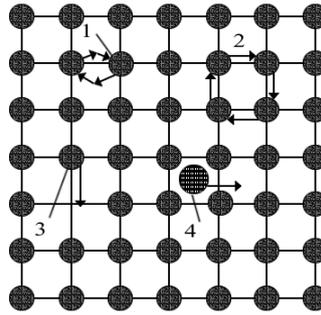


Рис. 2.3.

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. На рис. 2.4 схематически изображена зависимость энергии межузельного атома от координаты  $x$ .

Энергия, необходимая для такого перескока, называется энергией активации  $E_a$ . Она обычно значительно больше средней энергии теплового движения ( $\approx kT$ ). Вероятность такого события очень мала и задается формулой Больцмана:

$$P = P_0 \exp(-E_a / kT). \quad (2.3)$$

Поэтому атомы в кристаллах в течение длительного времени испытывают колебания около положения равновесия с некоторой частотой  $\nu$ , и только очень редко, когда случайно энергия тепловых колебаний превысит энергию активации, могут перепрыгнуть на новое место. Можно приблизительно оценить частоту  $f$  таких перескоков как:

$$f = \nu P. \quad (2.4)$$

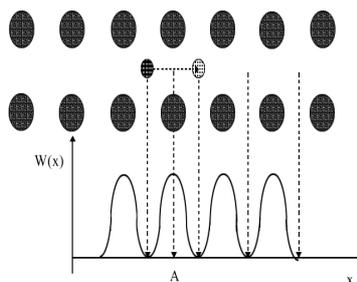


Рис. 2.4.

Зависимость энергии межузельного атома от координаты  $x$ . Энергия атома минимальна в междоузлиях и максимальна в положениях А.

Таким образом, атом в твердых телах перемещается редкими прыжками, на расстояние  $a$  и частотой  $f$  как это схематически показано на рис 2.5.

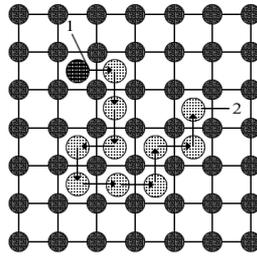


Рис. 2.5.

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  $dC/dx$ :

$$dN/dt = -DS(dC/dx) \quad (2.5)$$

Параметр  $D$  называется коэффициентом диффузии. Он зависит от типа диффундирующего атома и вещества, в котором происходит диффузия заданных атомов. Рассмотрим в кристалле направление  $[100]$  и перпендикулярную ему плоскость  $S$ , и проходящую через узлы решетки (отмечены кружочками на рис. 2.6 а). Также рассмотрим две параллельные соседние плоскости 1 и 2, проходящие соответственно слева и справа через ближайшие к выбранной плоскости междоузлия (обозначены квадратиками). Расстояние между плоскостями 1 и 2, равное расстоянию между междоузлиями, равно также параметру решетки и "длине перескока"  $a$ . Пусть на участке площади  $S$  плоскости 1 находится  $N_1$  межузельных атомов, а на таком же по площади участке плоскости 2 -  $N_2$  межузельных атомов (см. рис. 2.6 а).

Можно рассчитать входящие в закон диффузии концентрации  $C_1$  и  $C_2$  межузельных атомов в точке с координатой  $x$  и  $x + \Delta x$ . Очевидно:

$$C_1 = N_1 / \Delta V = N_1 / (Sa); \quad C_2 = N_2 / \Delta V = N_2 / (Sa). \quad (2.6)$$

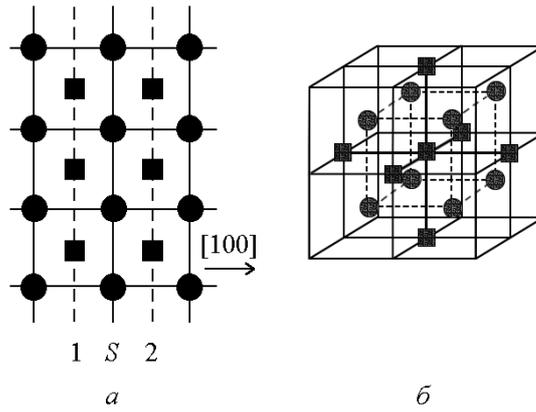


Рис. 2.6.

Расположение узлов и междоузлий кубической примитивной решетке (а)

Расположение междоузлий ближайших к заданному (б) в этой решетке

Вычислим число атомов  $\Delta N_1$ , пересекших за  $\Delta t$  плоскость  $S$  слева направо. Каждый атом первой плоскости может перепрыгнуть в одно из шести ближайших мест (см. рис. 2.6 б), только одно из них соответствует пересечению атомом выбранной центральной плоскости. Тогда

$$\Delta N_1 = (1/6) f N_1 \Delta t \quad (2.7)$$

Аналогично вычисляется число атомов  $\Delta N_2$ , пересекших за  $\Delta t$  выбранную плоскость  $S$  справа налево:

$$\Delta N_2 = (1/6) f N_2 \Delta t \quad (2.8)$$

Общее число атомов, пересекших плоскость, окажется равным:

$$\Delta N = \Delta N_1 - \Delta N_2 = (1/6) f (N_1 - N_2) \Delta t = (1/6) f \Delta t (C_1 - C_2) Sa \quad (2.9)$$

С учетом, что  $C_1 - C_2 = -(dC/dx)a$ , получаем:

$$\Delta N / \Delta t = -(1/6) f ((dC/dx)a) Sa \quad (2.10)$$

Сравнивая (2.10) и (2.5), получим, что коэффициент диффузии оказывается равным:

$$D = fa^2 / 6 \quad (2.11)$$

Примерно по такой же схеме можно рассчитать коэффициенты диффузии и в других изображенных на рис. 2.3 случаях, характерная энергия активации будет другой, причем в случаях 1 и 2 она будет больше, чем в случаях 3 и 4. Заметим, что энергия активации при перегруппировке атомов вблизи вакансии будет значительно меньше, чем в случаях 1 и 2.

Несмотря на то, что число вакансий в соответствии с (2.1) обычно небольшое, вклад в диффузию по механизму 3 значительно превосходит вклад в диффузию по механизму 1 и 2 из-за меньшей энергии активации и, следовательно, большей вероятности перескока атомов.

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

$$D = D_0 \exp(-E_a / kT) \quad (2.12)$$

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

С помощью рассмотренной выше модели диффузии можно оценить среднее смещение  $\langle x^2 \rangle$  атома в кристалле за время  $t = Nt_1 = N/f$  (здесь  $t_1 = 1/f$  (среднее время между последовательными перескоками атома)). Для этого вычисляют величину  $\langle x^2 \rangle$  в предположении о полной независимости последующих прыжков друг от друга [2]. В этом случае можно получить формулу:

$$\langle x^2 \rangle = a^2 N / 3 = a^2 ft / 3 = aD2t \quad (2.13)$$

Эта формула используется для экспериментального определения величины  $D$ .

Диффузия, происходящая главным образом за счет перемещения дефектов, является механизмом постепенного изменения числа дефектов в веществе. Известно (см. формулу (2.1)), что вероятность образования дефекта при температуре, значительно меньшей температуры плавления вещества, очень мала. 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.

Методы изучения точечных дефектов. Число вакансий в единице объема можно оценить по сопоставлению результатов точного определения параметра решетки рентгеновским методом и точного определения плотности вещества как отношения его массы к объему. Метод основан на том, что вакансии крайне мало изменяют параметр решетки, но увеличивают объем кристалла, а значит уменьшают его плотность. Таким же

способом, но с меньшей точностью, можно определить число межузельных атомов в единице объема, поскольку межузельные атомы несколько увеличивают плотность кристалла и слабее изменяют его параметр решетки. Если в кристалле присутствуют и вакансии и межузельные атомы, то описанным методом можно лишь оценить разность чисел вакансий и межузельных атомов в единице объема. Аналогично, плотность дефектов по Френкелю этим методом точно определить не удастся.

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 приближенно 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 2.8. 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. Она проходит через места, находящиеся около границы лишней полуплоскости, с наиболее сильными искажениями кристаллической решетки, вызванными этой полуплоскостью. Область сильных искажений вблизи дислокации простирается на 2-3 периода кристаллической решетки. На больших расстояниях искажения малы и их можно описывать в рамках теории упругости.

Появляется краевая дислокация чаще всего при деформации кристалла по схеме, изображенной на рис. 2.9. Прежде всего, заметим, что появляются дислокации при сдвиговых деформациях в плоскостях, наиболее густо занятых атомами, называемых *плоскостями скольжения*. Мы будем рассматривать случай простой кубической решетки и ее плоскость типа  $\{100\}$ . Отметим, что для ОЦК решетки плоскостями скольжения являются  $\{110\}$ ,  $\{112\}$ , и  $\{123\}$ , а для ГЦК решетки -  $\{111\}$ .

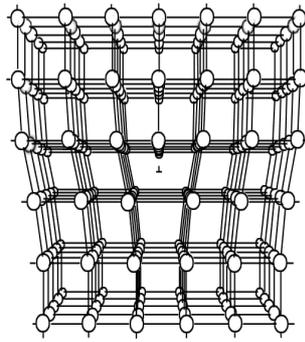


Рис. 2.8.

Схема расположения атомов вблизи краевой дислокации

Если на кристалл воздействовать силой  $\vec{F}$  (см. рис. 2.9 (1)), то плоскости (100) в месте, отмеченном пунктиром, могут "разорваться" (см. рис. 2.9 (2)), после чего верхняя половина плоскости 1 присоединится к нижней половине плоскости 2 (см. рис. 2.9 (3)), а верхняя половина плоскости 2 станет "лишней". Если продолжать воздействие на кристалл, то следующая плоскость разорвется, после чего верхняя половина плоскости 2 присоединится к нижней половине плоскости 3 (см. рис. 2.9 (4)), и так далее. Таким образом в кристалле появится лишняя полуплоскость (100), которая под воздействием силы  $\vec{F}$  сможет перемещаться вдоль плоскости скольжения за счет разрыва-соединения соседних половинок плоскостей. Заметим, что разрыв новой плоскости происходит как раз на линии дислокации, поскольку именно на ней искажения кристаллической решетки наибольшие (см. рис. 2.8).

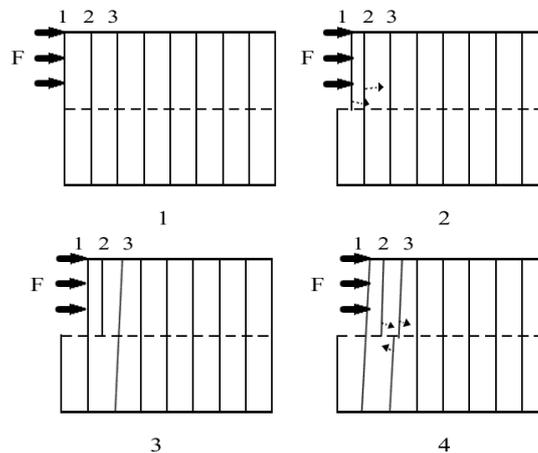


Рис. 2.9.

Схема зарождения и перемещения краевой дислокации при сдвиговой деформации кристалла

Винтовая дислокация. *Винтовая дислокация* представляет собой особое расположение атомов, изображенное на рис 2.10 для случая простой кубической решетки. На этом рисунке атомы, расположенные слева от половины 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. На рис. 2.10 видно,

что по горизонтальной, теперь уже деформированной плоскости типа (001) можно при повороте вокруг линии В подняться на 1 период кристаллической решетки, а совершив несколько оборотов вокруг линии В можно подняться на несколько периодов решетки. Подъем похож на движение по винтовой автостраде, отсюда и название винтовая дислокация. Заметим, что в случае винтовой дислокации все плоскости (010) перестали быть обособленными, они как бы слились в одну сложную винтовую поверхность с осью В. Изображенная на рис. 2.10 поверхность обеспечивает подъем при движении против часовой стрелки вокруг линии В (если смотреть сверху). Может быть построена такая же поверхность, которая обеспечивает подъем при движении по часовой стрелки вокруг линии В (для этого надо было правую часть кристалла на рис. 2. 10 смещать не вниз, а вверх). Поэтому винтовые дислокации бывают правовинтовые и левовинтовые.

Появляется винтовая дислокация при деформации кристалла по схеме, изображенной на рис. 2.11. Рассмотрим в случае простой кубической решетки плоскость типа {100}. Если на кристалл воздействовать силой  $\vec{F}$  (см. рис. 2.11 а), то плоскость А1 в месте, отмеченном стрелочкой, может "разорваться" по линии В, после чего нижняя и верхняя половинки плоскости А1 соединятся со сдвигом на 1 период решетки (см. рис. 2.11 б). Если продолжать воздействие на кристалл, то следующая плоскость разорвется, после чего нижняя и верхняя половинки плоскости А2 соединятся со сдвигом (см. рис. 2.11 в), и так далее.

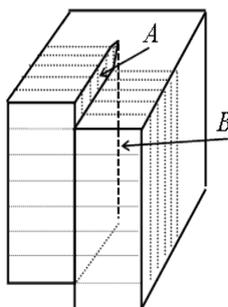


Рис. 2.10.

*Схема расположения атомных плоскостей вблизи винтовой дислокации*

Таким образом в кристалле появится винтовая дислокация, которая при воздействии на кристалл будет перемещаться вдоль плоскости скольжения за счет разрыва-соединения соседних половинок плоскостей. Заметим, что разрыв новой плоскости происходит как раз на линии дислокации, поскольку именно на ней искажения кристаллической решетки наибольшие (см. рис. 2.11).

Вектор Бюргерса. Винтовую дислокацию можно получить с помощью следующей модельной операции над кристаллом (см. рис. 2.12 а). На кристалле по плоскости (100) сделаем мысленный разрез по полуплоскости  $A$ , проходящей между узлами кристаллической решетки.

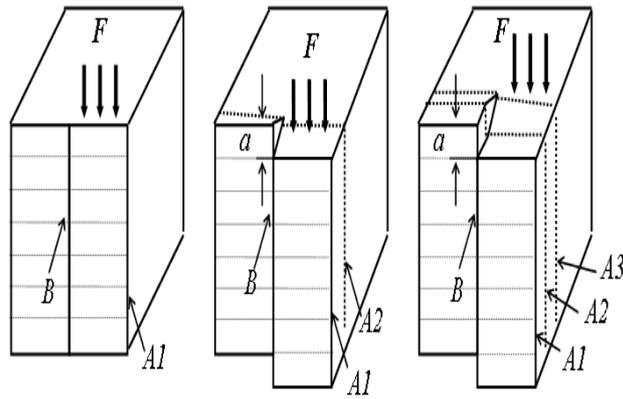


Рис. 2.11.

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  $A$ . Вектор смещения "левой" части кристалла относительно "правой" является вектором Бюргерса  $\vec{b}$  винтовой дислокации  $B$ . Видно, что вектор Бюргерса винтовой дислокации параллелен этой дислокации.

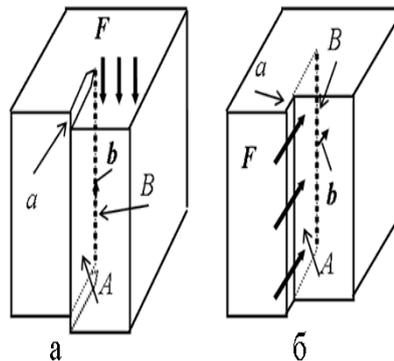


Рис. 2.12.

Схема смещения атомов кристалла в случае винтовой и краевой дислокации.  $\vec{b}$  - вектор Бюргерса

Аналогичным способом можно получить и краевую дислокацию (правда, отвечающую другой плоскости скольжения). Для этого "правую" часть кристалла надо сместить вдоль поверхности  $A$  "от нас" и срастить связи между всеми атомами, кроме расположенных вдоль линии дислокации  $B$  (см. рис. 2.12 а). Вектор смещения этой части кристалла является вектором Бюргерса краевой дислокации. Видно, что вектор Бюргерса краевой дислокации перпендикулярен этой дислокации.

Можно получить и краевую дислокацию, отвечающую плоскости скольжения (010). Для этого правую половину кристалла надо сместить перпендикулярно поверхности  $A$  "направо" на один период и заполнить промежуток атомами, тогда получается краевая

дислокация  $B$  (см. рис. 2.12). Вектор смещения этой части кристалла является вектором Бюргера краевой дислокации.

Дислокации смешанного типа. На рис. 2.13 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. 2.13), в результате которой только часть атомных связей в местах, отмеченных на рис. 2.13 штриховкой, разорвутся и соединятся со смещением на вектор  $\vec{b}$ . При продолжении воздействия дислокация А-В будет перемещаться, а заштрихованная площадь расширяться. Именно такие сложные дислокации смешанного типа обычно встречаются в кристаллах.

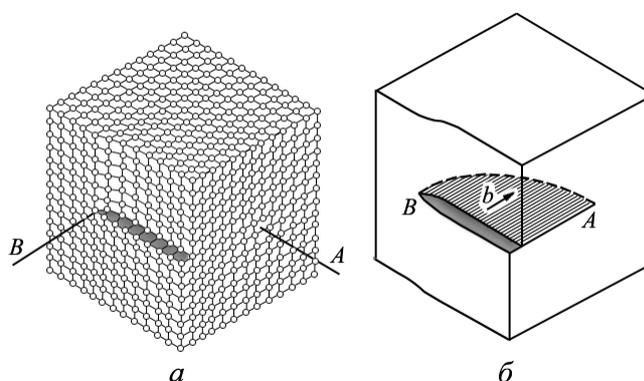


Рис. 2.13.

*Криволинейная дислокация смешанного типа*

Плотность дислокаций в кристаллах характеризуют числом дислокаций, пронизывающих единицу поверхности, выбранной внутри кристалла, или же, что почти то же самое, суммарной длиной дислокаций в единице объема кристалла.

Наблюдать дислокации можно с помощью электронных микроскопов практически при любой их плотности, а в достаточно совершенных монокристаллах - и с помощью рентгеновской топографии [4-6].

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.

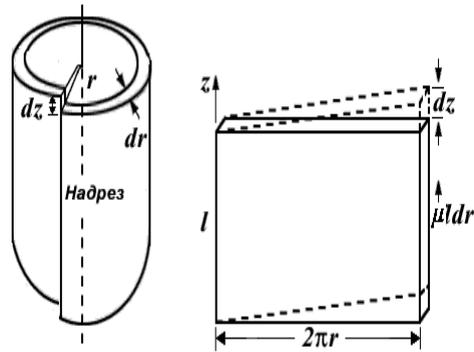


Рис. 2.15.

Картина деформации кристалла вблизи винтовой дислокации

Проще всего выполнить такой расчет для винтовой дислокации. На рис. 2.15 изображена картина упругих деформаций вблизи винтовой дислокации в предположении, что кристалл представляет собой сплошную изотропную среду. В таком случае пространство вокруг дислокации можно разбить на тонкие цилиндрические слои с внутренним радиусом  $r$  и внешним  $r + dr$ . Видно, что на полуплоскости каждый слой разрезан и соединен со сдвигом на вектор Бюргерса  $b$ . В таком случае в первом приближении каждый слой можно считать подвергнутым сдвиговой деформации с относительной деформацией  $\varepsilon = b / 2\pi r$  (для большей наглядности каждый цилиндр можно "раскрутить", как показано на рис. 2.15 и оценить величину сдвиговой деформации по этому рисунку). Плотность энергии сдвиговой деформации может быть вычислена через относительную деформацию  $\varepsilon$  и модуль сдвига  $\mu$  по формуле:

$$w = \mu \varepsilon^2 / 2 = (\mu / 2)(b / 2\pi r)^2 \quad (2.14)$$

Если эту формулу домножить на объем каждого цилиндра  $dV = 2\pi r l dr$  и проинтегрировать по всем допустимым значениям  $r$ , то можно получить оценку энергии винтовой дислокации длиной  $l$ .

$$U = (b^2 l \mu / 4\pi) \ln(R_0 / r_0) \quad (2.15)$$

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. В этой формуле не учтена энергия "ядра" дислокации - сильно искаженной области вблизи линии дислокации, что делается обычно

численными методами. Подставив типичные значения:

$$b = 2,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \mu = 10^{11} \text{ Н/м}^2; r_0 = 5 \cdot 10^{-10} \text{ м}; R_0 = 200 \cdot 10^{-10} \text{ м}_В \quad (2.14),$$

получим, что плотность энергии винтовой дислокации в расчете на единицу длины  $U/l = 4 \cdot 10^{-9} \text{ Дж/м}$ , а на одно межатомное расстояние (то есть на один атом) будет

$$U/b = 10^{-18} \text{ Дж/атом} = 6 \text{ эВ/атом}.$$

Это - очень большая величина, намного превосходящая энергию теплового движения атомов. Поэтому дислокация не может зародиться в результате теплового движения, для этого нужны неравновесные процессы, например деформация кристалла.

**Взаимодействие дислокаций.** Дислокация создает поля деформаций, которые могут воздействовать на другие дислокации. Так очевидно, что две дислокации, изображенные на рис. 2.16 (а), должны отталкиваться, а изображенные на рис. 2.16 (б) - притягиваться. Можно вычислить силу взаимодействия дислокации на единицу ее длины с полями механических напряжений, с другими дислокациями; однако эти вопросы, изложенные в [3], выходят за рамки учебника.

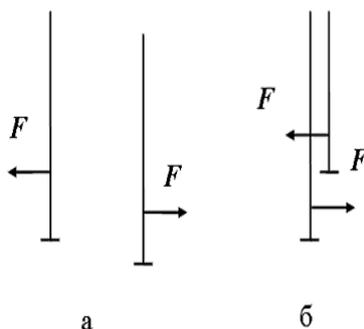


Рис. 2.16.

Расположение двух краевых дислокаций в случае их отталкивания (а) и притяжения (б)

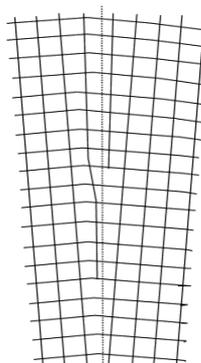


Рис. 2.17.

Дислокации на поверхности раздела (пунктирная линия) двух сросшихся монокристаллов со слегка разориентированными кристаллическими решетками

Дислокации, изображенные на рис. 2.16 (б) и 2.17, часто встречаются на границах двух сросшихся монокристалликов, кристаллические решетки которых слегка

разориентированы. Расчеты показывают, что при таком расположении дислокаций минимизируется энергия единицы поверхности раздела двух кристалликов.

Взаимодействие дислокаций и точечных дефектов. Дислокация, особенно краевая, создает сильно сжатые и сильно растянутые участки кристаллической решетки (см. рис. 2.18). 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. При пластической деформации сдвинуть такую дислокацию с места труднее, чем дислокацию без "шубы", поскольку в первом случае дислокация сместится на новое место, где ее энергия будет больше. Считают, что отдельные точечные дефекты и их скопления закрепляют дислокацию. В электронный микроскоп удается заметить появление крупных примесей вблизи дислокации. Рассмотренный ниже при рассмотрении теории прочности "зуб текучести" связывают с отрывом дислокации от шубы, для чего требуется дополнительное усилие.

Участки кристалла с растянутой кристаллической решеткой вблизи дислокации являются своеобразными каналами облегченной диффузии. Известно, что диффузия в сильно деформированных материалах, в которых плотность дислокаций больше, происходит быстрее, чем в недеформированных.

Точечные дефекты часто исчезают, попав на край "лишней" полуплоскости, создающей дислокацию (см. рис. 2.18); при этом изменяется форма края этой "полуплоскости". Также считают, что дислокации при движении способны порождать точечные дефекты, особенно вакансии, появляющиеся вблизи края лишней плоскости (см. рис. 2.18); при этом изменяется форма края этой "полуплоскости". Линия дислокации в таких процессах (называемых переползанием дислокации) смещается (переползает) на новое место.

Пластическая деформация кристалла и дислокации. Чтобы придать детали заданные размер и форму, многие материалы в процессе технологической обработки необратимо деформируют. Такие необратимые деформации наблюдаются при сильных деформациях детали, когда не выполняется закон Гука, а напряжение в детали сложным нелинейным образом зависит от относительной деформации.

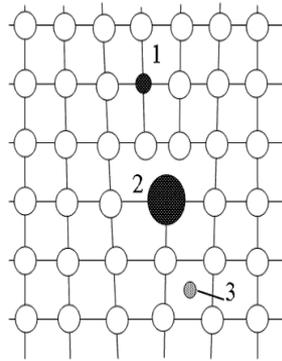


Рис. 2.18.

Энергетически выгодное расположение точечных дефектов вблизи дислокации: более мелкий атом - примесь замещения (1), более крупный атом - примесь замещения (2), атом внедрения (3)

Рассмотрим процесс растяжения поликристаллического образца. Обычно образец имеет форму длинного цилиндра с утолщениями на концах - для закрепления образца. Этот процесс характеризуют: а) механическим напряжением  $\sigma$ , равным отношению приложенной силы к площади сечения образца, и б) относительным удлинением  $\varepsilon$  образца:

$$\varepsilon = \Delta l / l = (l - l_0) / l_0, \quad (2.16)$$

где  $l$  - длина образца при воздействии напряжения  $\sigma$ , а  $l_0$  - первоначальная длина образца. На рис. 2.19 изображена типичная зависимость механического напряжения  $\sigma$  от относительного удлинения  $\varepsilon$  при растяжении образца. Кривая имеет 3 характерных участка. Участок 0-1 соответствует упругим обратимым деформациям, когда выполняется закон Гука. Участок 1-2 соответствует необратимым *пластическим деформациям*; если в точке А прекратить деформацию (сделать  $\sigma=0$ ), то состояние образца станет соответствовать точке В. Участок 2-3 соответствует разрушению образца. Часто вблизи точки 1 кривая имеет "зуб текучести" - пунктирная кривая на рис. 2.14. Его происхождение связано с точечными дефектами, которые скапливаются вблизи дислокаций, в таких местах, что уменьшаются деформации и плотность энергии вблизи дислокации, из-за чего дислокацию труднее сдвинуть при пластической деформации на новое место, где ее энергия будет больше.

Величину  $\sigma$ , отвечающую точке 1, называют *пределом текучести*  $\sigma_T$ , а отвечающую точке 2, называют *пределом прочности*  $\sigma_B$ .

Попытки рассчитать предел текучести без учета дислокаций приводили к завышенным на 2-4 порядка значениям. Попробуем и мы рассчитать предел текучести для модельной кристаллической решетки при сдвиговой деформации. Для этого остановимся на механизме пластической деформации.

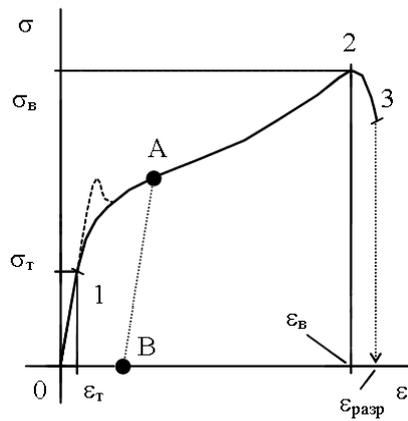


Рис. 2.19.

Зависимость напряжения  $\sigma$  от относительного удлинения  $\varepsilon$  при растяжении образца

Эксперименты показывают, что пластическая деформация происходит в первую очередь вдоль так называемых *плоскостей скольжения* ( атомных плоскостей, наиболее густо заселенных атомами. Пример такой плоскости приведен на рис. 2.20. 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  $B$  на рис. 2.20. При дальнейшем смещении атомам будет уже выгоднее "спуститься" в положения  $C$ . 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.

Можно оценить усилие, необходимое для того, чтобы сдвинуть верхнюю плоскость относительно нижней (см. рис. 2.20). Для этого воспользуемся связью механического напряжения и связанной с ней потенциальной энергии. На рис. 2.20. построена схематическая зависимость этой силы и связанной с ней потенциальной энергии от координаты  $x$ .

Зависимость  $\sigma_c(x)$  можно приближенно описать синусоидой с периодом  $a$  и амплитудой  $\mu a / (2\pi d)$ , где  $d$  - межплоскостное расстояние. Величину амплитуды этой синусоиды мы вычислили, воспользовавшись тем, что в области малых  $x$  тангенс наклона синусоиды (см. рис. 2.20) должен быть равен  $\mu\varepsilon = \mu(x/d)$ . Тогда для  $\sigma_c(x)$  получается формула:

$$\sigma_c(x) = \left\{ \frac{\mu a}{2\pi d} \right\} \sin(2\pi x / a) \quad (2.17)$$

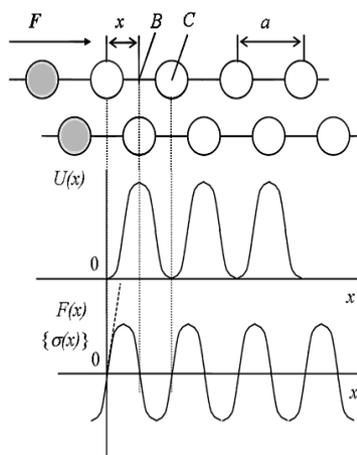


Рис. 2.20.

Схема деформации кристалла за счет скольжения верхней плоскости атомов относительно нижней

Величина  $\sigma_c(x)$  примет максимальное значение при  $x = a/4$ . Расчет по формуле (2.17) дает максимальное значение  $\sigma_c(x)$ , которое на 2-4 порядка больше типичных наблюдаемых на опыте. Причиной такого сильного расхождения является предположение об одновременном смещении всех атомов верхней плоскости относительно нижней (см. рис. 2.20). Однако смещение верхней полуплоскости на 1 межатомное расстояние может произойти за счет движения дислокации, как это было показано на рис. 2.9. Для такого смещения потребуется много меньшее усилие, поскольку теперь при смещении происходит не одновременный разрыв всех атомных связей, а только связей вблизи дислокации.

Дислокационный механизм пластической деформации объясняет наблюдаемые на опыте значения предела текучести  $\sigma_T$  и  $\sigma_B$ , а также и возрастание зависимости  $\sigma(\varepsilon)$  на участке 1-2 на рис. 2.19. При деформации сначала перемещаются менее сильно закрепленные дислокации, затем - более закрепленные, также при деформации увеличивается число дислокаций и прочих дефектов (см. ниже).

Предел текучести материала сильно зависит от плотности дислокаций в нем. На рис. 2.21 приведена такая зависимость. Видно, что предел текучести  $\sigma_T$  оказывается больше при очень малых значениях плотности дислокаций  $\rho_D$  и, наоборот, при больших плотностях дислокаций  $\rho_D$ . Увеличение  $\sigma_T$  при больших  $\rho_D$  связывают с взаимодействием дислокаций друг с другом и с другими дефектами кристаллической решетки.

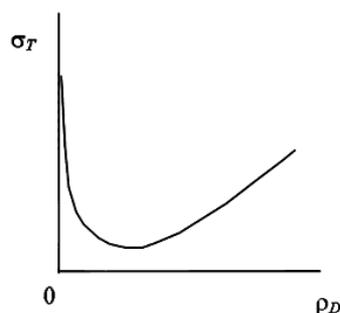


Рис. 2.21.

*Схематическая зависимость предела текучести от плотности дислокаций*

Пути увеличения прочности материалов. В настоящее время используют ряд способов увеличения прочности материалов, позволяющие достигать предела прочности порядка  $0.01 \mu$ ; большинство из них связаны с введением дополнительных препятствий движению дислокаций. Такими препятствиями являются различные дефекты: 1) выделения другой фазы (см. разд. 2.3); 2) точечные дефекты и их скопления (в частности, рассмотренная выше "шуба дислокации"); 3) большие количества дислокаций, тормозящие движение дислокаций за счет взаимодействия друг с другом; 4) ближний порядок в расположении атомов, этот вопрос рассмотрен в [1], его следует и здесь обсудить особо.

Во многих сплавах наблюдается явление, называемое *ближним порядком*, когда атом одного сорта стремится окружить себя преимущественно атомами другого сорта, при этом достигается меньшая энергия сплава. При движении дислокации разрываются более энергетически выгодные, а формируются менее выгодные связи между атомами. На это требуется большая энергия, что приводит к увеличению усилий, необходимых для смещения дислокации и, в конечном счете, к увеличению прочности материала.

Перечисленные способы хотя и значительно увеличивают прочность, но и, как правило, сильно уменьшают пластичность материала.

Прочность кристаллов может быть больше и при особо малой плотности дислокаций, когда затруднена деформация кристалла по дислокационному механизму.

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. 2.22. Пусть дислокация 1 закреплена в точках *A* и *B*. 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.

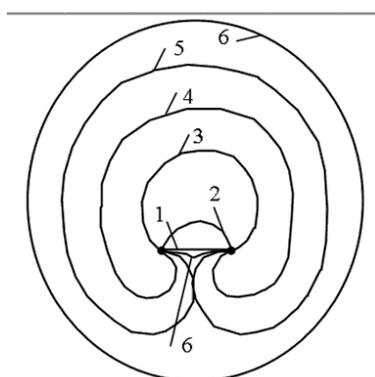


Рис. 2.22.

Источник дислокаций Франка-Рида

Также замкнутые дислокации появляются при образовании дископодобных скоплений вакансий (см. рис. 2.23) при охлаждении кристалла.

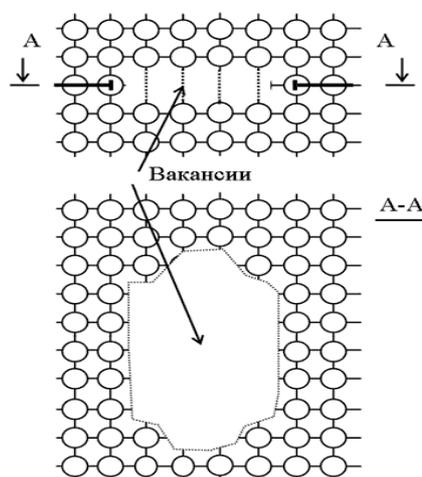


Рис. 2.23.

Дископодобные скопления вакансий эквивалентные дислокации смешанного типа в виде замкнутой линии

Дислокации и рост кристаллов. Винтовые дислокации облегчают рост кристаллов (как из расплавов, так растворов и паров), поскольку ступенька на поверхности кристалла (см. рис. 2.24), связанная с винтовой дислокацией, облегчает осаждение атомов на поверхность кристаллов в местах обозначенных на рис. 2.24 буквой  $A$ . Атомы прикрепляются под ступенькой большим числом связей, чем на гладкой поверхности кристаллов.

На поверхности достаточно совершенных кристаллов часто наблюдают следы подобных ступенек.

Поверхностные и объемные дефекты - сравнительно крупные дефекты, состоящие из большого числа атомов. В случае *поверхностных дефектов* область кристалла с сильно нарушенным периодическим расположением атомов имеет форму некоторой поверхности, толщина этой области в направлении нормали к поверхности составляет 1-2

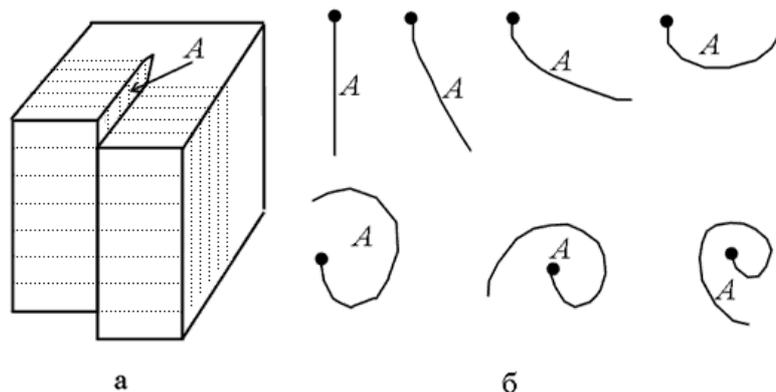


Рис. 2.24.

Винтовая дислокация на поверхности кристалла, облегчающая его рост (а) и последовательное изменение формы дислокации (б) при осаждении атомов на поверхность кристалла преимущественно в области под ступенькой - А

межплоскостных расстояния. В случае объемных дефектов область кристалла с нарушенным периодическим расположением атомов имеет форму некоторого тела, например эллипсоида, все размеры которого соответствуют нескольким межатомным расстояниям.

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. На границе раздела этих зерен неизбежно нарушается периодическое расположение атомов (см. рис. 2.17). Такие границы называют малоугловыми.

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.

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.

В настоящее время найдены пути управления формой и размерами областей выделяющихся объемных дефектов путем проведения специальных термообработок за счет использования энергии упругого взаимодействия кристаллических решеток областей фаз, внешнего магнитного поля во время проведения термообработок и некоторых других факторов.

### **Литература к теме 2.**

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука, 1978, 790 с.
2. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. - М.: Мир. - 1966. - 568 с.
3. Смирнов А.А. Молекулярно-кинетическая теория металлов. - М.: Наука, 1966, 488 с.
4. Томас Г., Гориндж М. Просвечивающая электронная микроскопия материалов. - М.: Наука. 1983.- 320 с.
5. Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. - М.: Изд-во МГУ им. М.В.Ломоносова, 1978, 278 с.
6. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. М.: Metallurgia, 1970, 360 с.

### Тема 3. Тепловые свойства кристаллов

Кристалл представляет собой систему упорядоченно расположенных атомов, обладающих определенными массами; между атомами действуют силы притяжения и отталкивания, уравнивающие друг друга при определенных равновесных расстояниях между атомами. При отклонении атома из положения равновесия возникает возвращающая сила, противоположная смещению, величина которой зависит от типа атома, его окружения и направления смещения в кристалле. Согласно классической теории колебаний, в такой системе "упруго-связанных масс", состоящей из  $N$  атомов, имеют место нормальные колебания с собственными частотами  $\omega_i$ , где  $i = 1; 2; \dots; N - 4; N - 3$ ; причем колебания с частотами  $\omega_i$ , являются независимыми друг от друга; движение атомов может быть представлено как суперпозиция этих нормальных колебаний.

Именно как набор независимых осцилляторов с индивидуальными собственными частотами  $\omega_i$  и рассматривается кристалл как в классической, так и в квантовой теории тепловых свойств кристаллов и молекул [1-3].

Согласно классической теории, при температуре  $T$  в среднем каждый осциллятор будет обладать энергией  $kT$ ; всего осцилляторов  $3N - 3 \approx 3N$ , следовательно кристалл будет обладать энергией  $U = 3NkT$ . Молярная теплоемкость кристалла окажется равной:  $C_v = (\partial U / \partial T)_v = N_A 3k = 3R$ . Это - известный закон Дюлонга и Пти, утверждающий что молярная теплоемкость любых кристаллических веществ одна и та же и равна  $3R$ . Он сравнительно хорошо выполняется только при сравнительно высоких температурах порядка 700-2000 К. При более низких температурах он не выполняется даже приближенно.

Значительно более точное описание тепловых свойств кристалла дает квантовая теория теплоемкости кристаллов, разработанная Эйнштейном и Дебаем. В ее основе лежит предположение о квантовании энергии колебаний, подобно тому как квантовалась энергия электромагнитных колебаний в квантовой теории теплового излучения.

Согласно квантовой теории, энергия каждого нормального колебания квантуется по тем же законам, как и энергия одиночного осциллятора. Энергию  $\hbar\omega$  считают квантом (порцией) энергии колебаний осциллятора, сам же квант принято называть фононом и рассматривать его как частицу, обладающую, в частности, такими свойствами частицы, как энергия  $E = \hbar\omega$  и импульс  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . Взаимная независимость нормальных колебаний

позволяет использовать для их описания теорию Бозе-газа, в которой в качестве частиц-Бозонов рассматривают фононы. В следующих разделах будет показано, что квантовая теория колебаний кристалла позволяет правильно объяснять многие наблюдаемые на опыте закономерности, в частности, зависимость теплоемкости и теплопроводности от температуры. Эта теория, называемая еще фононной теорией, позволяет объяснять и многие другие явления, связанные с рассеянием излучений и частиц веществом, передачей энергии и заряда. Для многих задач важно знать характеристики фононов, которые можно экспериментально исследовать различными методами.

Остановимся на способах изучения фононов, позволяющих определять энергию и импульс отдельного фонона. Эти способы основаны на взаимодействии фонона с падающими на кристалл частицами: нейтронами, электронами, фононами или фотонами (электромагнитным излучением рентгеновского, оптического или инфракрасного диапазонов). В таких опытах независимо измеряются энергии и импульсы падающих на кристалл и рассеянных кристаллом частиц, затем на основании законов сохранения энергии и импульса определяются независимо энергия и импульсы фононов. Проще начать рассмотрение с процесса взаимодействия фотона и фонона.

Взаимодействие фотона с деформированной кристаллической решеткой. Пусть фотон с энергией  $E = \hbar\omega$  взаимодействует с кристаллом, обладающим показателем преломления  $n$ . Если в кристалле имеется фонон с энергией  $E = \hbar\Omega$  и импульсом  $\vec{P} = \hbar\vec{K}$ , то упругая волна, связанная с фононом, приведет к сжатию одних областей кристалла и растяжению других, а значит и к изменению показателя преломления  $n$  в разных точках кристалла. Получится некоторое подобие дифракционной решетки (см. рис. 3.1), на которой падающие фотоны будут дифрагировать. На рис. 3.1 видно, что помимо основного не рассеянного пучка фотонов появятся минимум два дифракционных. Принято считать, что изменение направления движения фотона обусловлено поглощением или порождением фонона, связанного с колебаниями кристалла и вызвавшего изображенную на рис. 3.1 модуляцию показателя преломления  $n$  кристалла.

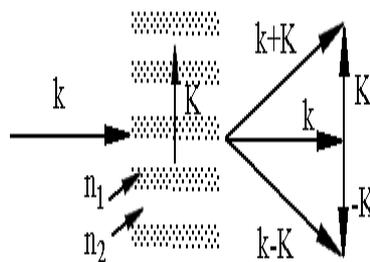


Рис. 3.1.

*Схема взаимодействия фотона с периодически деформированной кристаллической решеткой*

Взаимодействие фотона и фонона удобно изображать с помощью векторов (см. рис.

3.2). Фотон, имевший энергию  $E = \hbar\omega$  и импульс  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ , в результате порождения фонона с энергией  $E = \hbar\Omega$  и импульсом  $\vec{p} = \hbar\vec{K}$  приобретет новые значения  $E' = \hbar\omega'$  и  $\vec{p}' = \hbar\vec{k}'$ . Эти величины связаны соотношениями:

$$\hbar\omega' = \hbar\omega + \hbar\Omega \quad \text{и} \quad \hbar\vec{k}' = \hbar\vec{k} + \hbar\vec{K}, \quad (3.1)$$

выражающими законы сохранения энергии и импульса.

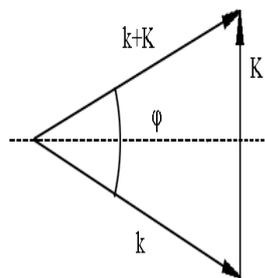


Рис. 3.2.

*Соотношения между векторами фотонов и фонона при их взаимодействии*

Следует отметить, что из-за сильного отличия скоростей  $v$  фононов и  $c$  фотонов сильно отличаются их частоты и энергии, отвечающие одним и тем же значениям  $k = K$ .

Действительно  $\omega = ck$ ;  $\Omega = vK$ . Так как  $c \gg v$ , то  $\omega \gg \Omega$ . Тогда согласно (3.1)  $\omega \approx \omega'$  и  $k \approx k'$ , то есть при взаимодействии с фононом частота и импульс фотона меняются незначительно. В соответствии с рис.3.2

$$K \approx 2k \sin(\varphi/2). \quad (3.2)$$

Можно получить формулу, связывающую частоту поглощенного (порожденного) фонона с углом  $\varphi$  и частотой фотона, подобную формуле Комптона.

$$\Omega = vK \approx (2n\omega/c) \sin(\varphi/2). \quad (3.3)$$

Малость величины  $v/c$  приводит к тому, что отношение  $\Omega/\omega$  также оказывается малым - при рассеянии фотонов на фононах относительное смещение частоты  $\Delta\omega/\omega$  фотона оказывается такого же порядка и его трудно регистрировать экспериментально.

Рассеяние света на фононах. Для наблюдения рассеяния света на фононах используют узкий пучок высокомонохроматического излучения. Под определенным углом  $\varphi$

регистрируют спектр рассеянного света; таким образом фиксируются направления векторов  $\vec{k}'$  и  $\vec{k}$ . В спектре рассеянного излучения помимо главной интенсивной линии с частотой  $\omega$  присутствуют линии, соответствующие процессам рождения и поглощения фотонов, смещенные на  $\pm \Omega$  по частоте. Таким образом удается независимо определять  $\vec{k}$ ,  $\vec{k}'$ ,  $\omega$  и  $\omega'$ , а затем определять  $\vec{K}$  и  $\Omega$  и связь между ними. Поскольку для световых волн  $\vec{k}'$  и  $\vec{k}$  малы, то таким методом удастся исследовать фононы с малым  $\vec{K}$  (длинноволновые фононы).

Рассеяние рентгеновских лучей на фононах. Этим методом удастся исследовать фононы с большим волновым вектором, поскольку для рентгеновских лучей  $|k|$  порядка зоны Бриллюэна. Рассеяние нейтронов на фононах - в настоящее время является самым информативным методом изучения фононов [4]. Для изучения фононных спектров можно использовать и рассеяние других частиц, например электронов, однако эти методы требуют как правило высокого вакуума в большой камере и уступают по разрешающей силе другим методам, например, рассеянию нейтронов. Изучают фононные спектры и используя рассеяние фононов (ультразвуковых волн) кристаллом, однако этот метод по информативности уступает другим.

В данном разделе рассмотрены простейшие случаи теоретического построения зависимости частоты фононов от их волнового вектора, называемой *дисперсионной зависимостью фонона*. В общем случае эта задача - очень сложна и решается как правило численными методами.

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. 3.5).

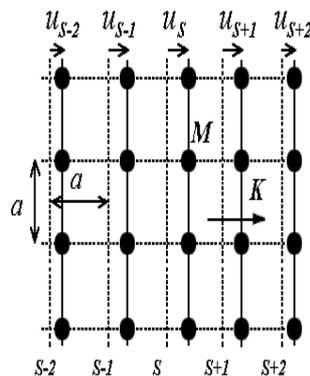


Рис. 3.5.

Колесания 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  $F_{\mathcal{P}}$ . 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  $F_{\mathcal{P}}$ :

$$F_s = \sum_{p \neq 0} F_{\mathcal{P}} = \sum_{p \neq 0} C_p (u_{s+p} - u_s) \quad (3.5)$$

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

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = \sum_{p \neq 0} C_p (u_{s+p} - u_s) \quad (3.6)$$

Будем искать функцию  $u_s$  в виде плоской продольной волны:

$$u_{s+p} = u_0 \exp(-i\omega t + iKx) = u_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKa(s + p)) \quad (3.7)$$

После подстановки (3.7) в (3.6) и сокращения общих сомножителей получим выражение для  $\omega^2$ :

$$M\omega^2 = -\sum_{p \neq 0} C_p (\exp(ipKa) - 1) \quad (3.8)$$

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

$$\begin{aligned} \omega^2 M &= -\sum_{p > 0} C_p (\exp(ipKa) + \exp(-ipKa) - 2) = \\ &= 2 \sum_{p > 0} C_p (1 - \cos(pKa)). \end{aligned} \quad (3.9)$$

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

$$\omega^2 = (2/M)C_1(1 - \cos(pKa)) = (4C_1/M)(\sin(Ka/2))^2. \quad (3.10)$$

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.

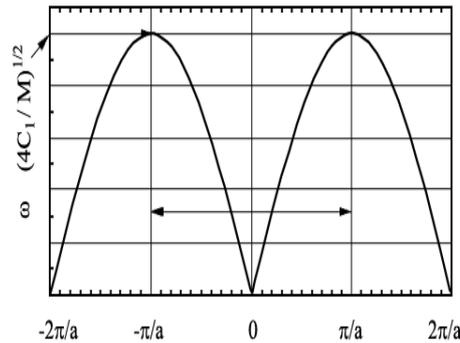


Рис. 3.6.

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

Такая же особенность зависимости  $\omega(K)$  следует и из (3.9), учитывающей взаимодействие с выбранным атомом нескольких атомных плоскостей. В случае  $K = \pi/a$  в соответствии с (3.7) соседние атомы будут двигаться в противофазе, что соответствует стоячей волне с пучностями в местах расположения атомов. Образование стоячей волны в этом случае связано с отражением волны от каждого из атомов и интерференционным усилением отраженных волн. В самом деле, условие усиления волн, отраженных от атомов, расположенных на расстоянии  $a$ , (см. рис. 3.5) имеет вид  $\Delta_{\text{опт}} = 2a = \lambda n = 2\pi/K$  ( $n=1$ ), откуда  $K = \pi/a$ .

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.

Заметим, что при описании колебаний атомов в волне формулой (3.7) закон движения атомов получается одинаковым, если к величине  $K$  прибавлять или отнимать величину  $2\pi/a$ , равную вектору обратной решетки. Поэтому для описания движений атомов в нашем простом случае достаточно использовать значения  $K$ , удовлетворяющие условию  $K \leq \pi/a$ . В трехмерном случае этому условию удовлетворяют  $K$ , лежащие внутри первой зоны Бриллюэна.

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. 3.7). Пусть атомы имеют массы  $M_1$  и  $M_2$ .

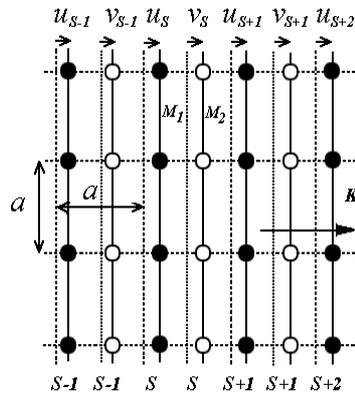


Рис. 3.7.

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. 3.7 атомы с массой  $M_1$ , расположенные в одной плоскости  $(100)$  с номером  $S$ , будут смещаться на величину  $u_s$  одной фазой вдоль нормали к этой плоскости (вдоль направления  $[100]$ ), то есть вся плоскость атомов будет колебаться как целое. Аналогично светлые атомы (см. рис. 3.7) 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. 3.7) плоскости с номером  $S$

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

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C((u_{s+1} - v_s) + (u_s - v_s)).$$
(3.11)

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

$$u_s = u_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKas); \quad v_s = v_0 \exp(-i\omega t) \exp(iKas)$$
(3.12)

После подстановки (3.12) в (3.11) получим систему двух линейных однородных уравнений относительно  $u$  и  $v$ :

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

$$-\omega^2 M_2 v = Cu(1 + \exp(iKa)) - 2Cv,$$
(3.13)

которая имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю.

$$\begin{vmatrix} 2C - \omega^2 M_1 & -C(1 + \exp(-iKa)) \\ -C(1 + \exp(iKa)) & 2C - \omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0,$$
(3.14)

Уравнение (3.14) можно, расписать в виде:

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2) \omega^2 + 2C^2(1 - \cos(Ka)) = 0.$$
(3.15)

Результаты решения уравнения (3.15) при произвольных  $K$  приведены на рис. 3.8.

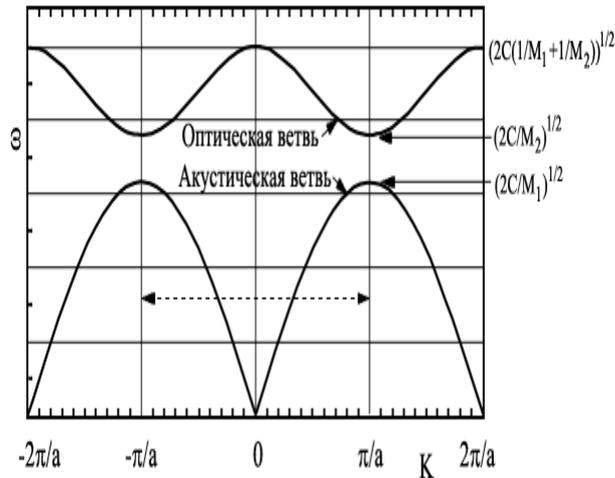


Рис. 3.8.

Зависимость частоты  $\omega$  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  $\cos(Ka) \approx 1 - (1/2)K^2a^2$ . Тогда уравнение (3.15) имеет два корня:

$$\omega^2 \approx 2C / (1/M_1 + 1/M_2); \quad \omega^2 \approx CK^2a^2 / 2(M_1 + M_2). \quad (3.16)$$

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

Для оптической ветви из (3.13) следует, что атомы колеблются приблизительно в противофазе, а именно при  $K \approx 0$  выполняется соотношение:  $u/v = -M_1/M_2$ . Такой вид колебаний (см. рис. 3.9 б) 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.

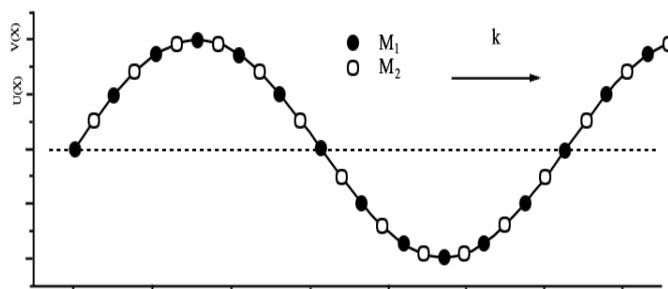


Рис. 3.9а.

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

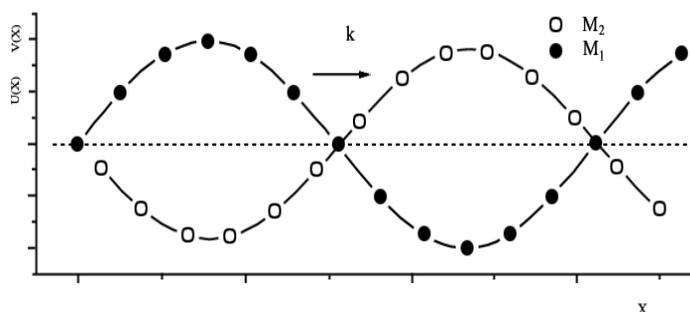


Рис. 3.9б.

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

Для акустической ветви из (3.13) следует, что атомы колеблются приблизительно в одной фазе, а именно при  $K \approx 0$  выполняется соотношение:  $u/v = 1$ . Такой вид колебаний (см. рис. 3.9 а) 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".

Интересен случай когда  $K = \pm\pi/a$ . В этом случае уравнение (3.15) сильно упрощается и для  $\omega^2$  получаются два корня:  $\omega^2 \approx 2C/M_1$  или  $\omega^2 \approx 2C/M_2$ . На рис. 3.8 видно, что при  $K = \pm\pi/a$  больший корень попадает на оптическую ветвь, а меньший - на акустическую.

Видно, что существует область  $\omega^2$ , где нет решений уравнения (3.14), а значит волна не может распространяться в кристалле с двухатомной элементарной ячейкой. Более детальный анализ показывает, что решения уравнения (3.15) для этой области частот отвечают комплексным значениям  $K$ . Это соответствует быстрому уменьшению амплитуды волны в среде. Подробнее эти вопросы рассмотрены в [1].

Колебания атомов в многоатомной решетке - можно рассмотреть по той же схеме, что и двухатомной. Однако такое рассмотрение намного труднее с математической точки зрения (потребуется решать большее число уравнений, определитель (3.14) однородной системы будет большего порядка, и т.д.). В результате в случаях, аналогичных рассмотренным выше, для ячейки, содержащей  $r$  атомов, получаются  $r$  корней уравнения типа (3.14) 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.

Как уже отмечалось в начале главы, внутренняя энергия (а затем и теплоемкость) кристалла в принципе может быть вычислена путем определения всех частот нормальных колебаний кристалла и определением энергии всех осцилляторов, используя распределение Бозе-Эйнштейна. Если вторая часть задачи трудностей не вызывает, то ее первая часть чрезвычайно сложна в математическом отношении, она решена в настоящее время только для сравнительно простых молекул. Поэтому были найдены упрощенные способы вычисления спектра собственных частот осцилляторов, некоторые из них рассмотрены в данном разделе.

Модель Эйнштейна. В модели Эйнштейна считают, что атомы колеблются независимо друг от друга и что частоты колебаний всех атомов одинаковы. В таком случае для подсчета внутренней энергии кристалла, содержащего  $N$  атомов, достаточно рассмотреть один

осциллятор, а затем домножить результат на  $3N$  - число осцилляторов. Пусть каждый осциллятор имеет частоту  $\omega$ . Средняя энергия, запасенная в таком осцилляторе, вычисляется с использованием распределения Бозе-Эйнштейна (см. том 5):

$$\langle E \rangle = \langle n \rangle \hbar \omega = \hbar \omega / (\exp(\hbar \omega / kT) - 1), \quad (3.17)$$

где  $\langle n \rangle = 1 / (\exp(\hbar \omega / kT) - 1)$  - среднее число квантов энергии, "запасенных" в осцилляторе.

Энергия кристалла, содержащего  $N_A$  атомов, тогда вычисляется как  $\langle E_{mol} \rangle = 3N_A \langle E \rangle = 3N_A \langle n \rangle \hbar \omega$ , а теплоемкость при постоянном объеме - дифференцированием энергии по температуре:

$$C_V = (\partial E / \partial T)_V = 3N_A k (\hbar \omega / kT)^2 \exp(\hbar \omega / kT) / (\exp(\hbar \omega / kT) - 1)^2. \quad (3.18)$$

Модель дает хорошее совпадение с экспериментом для температур выше 50-100 К (не слишком близких к абсолютному нулю). График зависимости  $C_V(T)$  приведен на рис. 3.10.

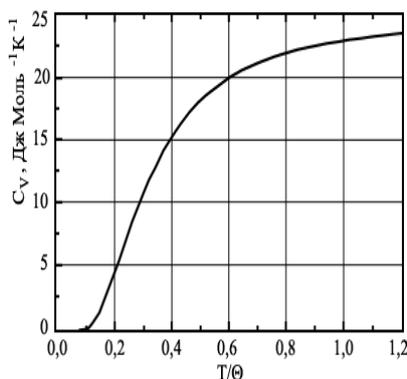


Рис. 3.10.

Зависимость теплоемкости  $C_V$  от температуры, рассчитанная в рамках модели Эйнштейна для частоты осциллятора, равной  $\omega = k\Theta / \hbar$

При  $\hbar \omega \ll kT$  (случай высоких температур)  $C_V \approx 3N_A k = 3R$ , что соответствует известному закону Дюлонга и Пти. При  $\hbar \omega \gg kT$  (случай низких температур)  $C_V \approx 3N_A k (\hbar \omega / kT)^2 \exp(-\hbar \omega / kT) \rightarrow 0$  при  $T \rightarrow 0$ , как этого требует третье начало термодинамики. Однако, убывание  $C_V(T)$  оказывается более быстрым, чем наблюдают экспериментально ( $C_V \approx const T^3$ ). Это связано с некорректностью допущений о независимости колебаний отдельных атомов. Известно, что атомы взаимодействуют друг с

другом, например ( [раздел 3.2](#)), в кристалле существуют упругие волны с разной длиной волны, соответствующие коллективным, зависящим друг от друга, колебаниям атомов.

Все же модель Эйнштейна хорошо описывает теплоемкость кристаллов при комнатных и более высоких температурах. Также эта модель идеально подходит для описания теплоемкости отдельных молекул и хорошо подходит для описания вклада оптических фононов (частота которых обычно слабо зависит от волнового вектора) в теплоемкость кристаллов.

Учет коллективных нормальных колебаний атомов значительно уточняет описание теплоемкости при низких температурах. Дело в том, что акустические коллективные колебания имеют более низкие частоты. Энергии тепловых колебаний порядка  $kT$  хватает для их возбуждения. Такие колебания смогут давать вклад в теплоемкость и при низких температурах. Согласно же модели Эйнштейна, все осцилляторы обладают одной сравнительно большой частотой и разностью энергий соседних энергетических уровней  $\hbar\omega$ , из-за чего переходы с одного уровня осциллятора на другой при низких температурах, если  $\hbar\omega \gg kT$ , будут крайне маловероятны, в таком случае и вклад во внутреннюю энергию и в теплоемкость будет очень мал.

Подход к вычислению энергии колебаний кристалла. Как отмечалось выше, вычисление спектра частот нормальных колебаний является слишком сложной задачей. Поэтому при вычислении энергии колебаний атомов в кристалле обычно используют различные упрощения. Чаще всего разрешенные значения волновых векторов фононов вычисляют по той же схеме как это делалось в теории Ферми-газа или же при выводе распределения Планка (см. том 5), а именно, рассматривают кубический кристалл с характерным размером  $L$ . Затем, волновые функции, описывающие упругие колебания кристалла, ищут в комплексном виде:

$$f(x, y, z, t) = \exp(i\vec{r}\vec{K} - i\omega t) \quad (3.19)$$

Далее, накладывают периодические граничные условия на вид функций  $f(x, y, z, t)$ , описывающих упругие колебания кристалла:

$$\begin{aligned} f(x + L, y, z, t) &= f(x, y, z, t); \\ f(x, y + L, z, t) &= f(x, y, z, t); \\ f(x, y, z + L, t) &= f(x, y, z, t), \end{aligned} \quad (3.20)$$

которые выполняются, если:

$$\exp(iLK_x) = 1; \quad \exp(iLK_y) = 1; \quad \exp(iLK_z) = 1; \quad (3.21)$$

Тогда волновой вектор  $\vec{K}$  может принимать дискретные значения:

$$K = (2\pi n_1 / L; \quad 2\pi n_2 / L; \quad 2\pi n_3 / L); \quad (3.22)$$

где  $n_1, n_2, n_3$  - целые числа.

В таком случае на одно разрешенное значение вектора  $\vec{K}$  приходится объем  $K$ -пространства равный  $V_K = (2\pi / L)^3 = (2\pi)^3 / V$ , где  $V = L^3$  - объем кристалла. Затем предполагают определенный вид зависимости частоты от волнового вектора  $\vec{K}$ . Часто зависимости  $\omega(\vec{K})$  вычисляют теоретически (см. раздел 3.2), а иногда и с учетом полученных экспериментально зависимостей  $\omega(\vec{K})$ . Эти зависимости как правило похожи на приведенные в разделах 3.1 и 3.2. Далее, область разрешенных значений векторов  $\vec{K}$  разбивают на участки, в пределах которых  $\omega(\vec{K})$  меняется незначительно, чтобы можно было пользоваться формулами, аналогичными используемым в модели Эйнштейна. Затем, как правило численными методами, суммируют вклады от всех участков в вычисляемую физическую величину, например внутреннюю энергию.

В сферически-симметричных случаях (когда  $\omega$  зависит только от модуля  $K$ ) удобно пользоваться функцией распределения числа нормальных колебаний по частоте  $D(\omega)$ , показывающей сколько нормальных колебаний  $dN$  приходится на интервал частот  $d\omega$  вблизи  $\omega$ :

$$dN(\omega) = D(\omega)d\omega. \quad (3.23)$$

С помощью  $D(\omega)$  можно находить средние значения многих величин, по той же схеме, как это делалось с помощью распределения Максвелла, например:

$$\langle E \rangle = \int E(\omega) D(\omega) d\omega = \int \hbar \omega \langle n(\omega) \rangle D(\omega) d\omega. \quad (3.24)$$

Функция  $D(\omega)$  обязана удовлетворять условию нормировки:

$$3N = \int D(\omega) d\omega, \quad (3.25)$$

требующему, чтобы общее число нормальных колебаний равнялось  $3N$ .

Рассмотрим применение этого подхода на примере модели Дебая.

Модель Дебая. В рамках *модели Дебая* считают, что  $\omega = Kv$ , где  $v$  - скорость звуковых волн. Такое приближение называется приближением сплошной среды. Ясно, что при таком подходе не удастся учесть дисперсию и оптические ветви дисперсионной зависимости фононов (см. раздел 3.2). При этом дополнительно считают, что  $v$  - взвешенная скорость, то есть имеющая промежуточное значение между скоростями поперечных и продольных волн, как известно сильно отличающихся друг от друга. Зависимость  $\omega(\vec{K})$  является сферически симметричной, что упрощает расчеты. Число разрешенных векторов  $\vec{K}$ , с модулем меньших заданного в таком случае можно найти, разделив объем сферы радиуса  $|\vec{K}|$  в  $K$ -пространстве на объем, приходящийся на одно разрешенное значение вектора  $\vec{K}$ :

$$N_K = (4\pi K^3 / 3) / (2\pi / L)^3 = (L / 2\pi)^3 (4\pi \omega^3 / 3v^3) = V \omega^3 / (6v^3 \pi^2) \quad (3.26)$$

Функцию  $D(\omega)$  можно найти из соотношения  $dN_K = D(\omega)d\omega$ . Величину  $dN_K$  можно найти налогичным способом, разделив на  $(2\pi / L)^3$  величину объема слоя в  $K$ -пространстве, для которого значения  $|\vec{K}|$  находятся в промежутке  $[|\vec{K}|; |\vec{K} + d\vec{K}|]$ . Тогда, с учетом, что  $\vec{L}^3 = V$ , получим выражение для  $D(\omega)$ :

$$D(\omega) = dN_K / d\omega = (4\pi K^2 dK) / ((2\pi / L)^3 d\omega) = V \omega^2 / (2v^3 \pi^2) \quad (3.27)$$

Необходимо помнить об условии нормировки. Это условие требует, чтобы общее число осцилляторов равнялось  $3N$ . В рамках модели Дебая просто ограничивают модуль вектора  $\vec{K}$  некоторым максимально возможным значением  $K_D$ , которое будучи подставленным в (3.26), даст в левой части  $N$  - общее число осцилляторов с данным типом поляризации. Выражая из (3.26)  $K_D$  и  $\omega_D = vK_D$  получаем:

$$\begin{aligned} \omega_D &= ((6Nv^3 \pi^2) / V)^{1/3}; \\ K_D &= ((6N\pi^2) / V)^{1/3}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Вид функции  $D(\omega)$  приведен на рис. 3.11 (кривая 1).

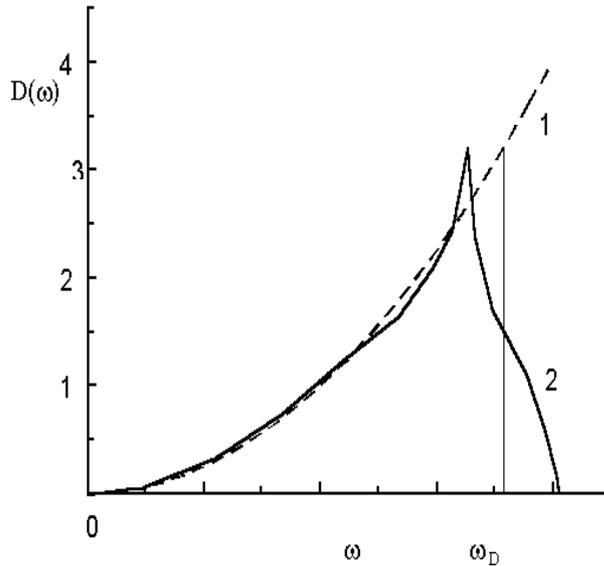


Рис. 3.11.

Функция плотности состояний  $D(\omega)$  в модели Дебая

Значения  $K_D$  оказываются близкими к  $\pi/a$ , соответствующему границе первой зоны Бриллюэна. Однако следует помнить, что реальная область допустимых значений вектора  $\vec{k}$ , совпадающая с первой зоной Бриллюэна, в рамках модели Дебая заменяется на не совпадающую с ней сферу.

Внутренняя энергия, отвечающая всем трем типам поляризации осцилляторов, в рамках теории Дебая вычисляется как интеграл:

$$\begin{aligned}
 E &= 3 \int \hbar \omega n(\omega, T) D(\omega) d\omega = 3 \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / kT) - 1} \left( \frac{V \omega^2}{2\pi^2 v^3} \right) d\omega = \\
 &= \frac{3Vk^4 T^4}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} \int_0^{x_D} \frac{x^3 dx}{\exp(x) - 1}.
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

Здесь  $x = \hbar \omega / kT$  и  $x_D = \omega_D \hbar / kT = \Theta / T$ . Через  $\Theta$  обозначают *температуру Дебая* равную:

$$\Theta = \omega_D \hbar / k = (v \hbar / k) ((6N^3 \pi^2) / V)^{1/3}. \tag{3.30}$$

Следует отметить, что интеграл (3.29) можно вычислить только численными методами.

Для вычисления теплоемкости  $C_V$  следует продифференцировать (3.29) по температуре  $T$

:

$$C_V = \left( \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v^3 kT^2} \right) \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 \exp(\hbar\omega/kT)}{(\exp(\hbar\omega/kT) - 1)^2} d\omega =$$

$$= \frac{9Nk^3 T^3}{\Theta^3} \int_0^{x_D} \frac{\exp(x)x^4 dx}{(\exp(x) - 1)^2}. \quad (3.31)$$

Полученный интеграл, как и выражение (3.29), можно вычислить только численными методами, график зависимости  $C_V(T)$  приведен на рис. 3.12.

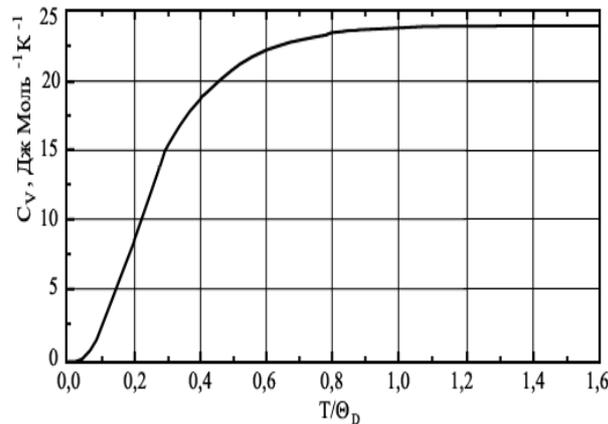


Рис. 3.12.

Зависимость теплоемкости  $C_V(T)$ , рассчитанная в рамках модели Дебая. По оси абсцисс отложена приведенная температура  $T/\Theta$

При высоких значениях температуры  $C_V(T)$  стремится к  $3R$ - классическому значению.

При малых температурах  $C_V(T) \approx const \cdot T^3$ , покажем это. Примем во внимание, что при  $T \rightarrow 0$  в (3.31)  $x \rightarrow \infty$  и  $x_D \rightarrow \infty$ . Тогда пределы интегрирования в (3.31) можно считать нулем и бесконечностью. Сам же интеграл последней формуле (3.31) окажется равным некоторой константе и из (3.31) зависимость  $C_V(T) \approx const \cdot T^3$ , оказывается очевидной.

Закон  $C_V(T) \approx const \cdot T^3$  при  $T \rightarrow 0$  можно получить из следующих достаточно наглядных соображений. При  $T \rightarrow 0$  основной вклад в  $C_V$  будет обеспечен акустическими колебаниями (а именно их и описывает модель Дебая) с малыми частотами, такими, что  $kT > \hbar\omega = v\hbar K$ . В  $K$ -пространстве областью таких векторов является сфера, объем которой пропорционален  $(kT)^3$ . Каждый фотон в среднем будет иметь энергию порядка  $(kT)^1$ . Тогда получается, что "запас" энергии пропорционален числу нормальных колебаний

и средней энергии каждого из них, то есть  $(kT)^4$ . Теплоемкость  $C_V$  можно найти как производную энергии по температуре:

$$C_V(T) = (\partial E / \partial T)_V \approx \text{const} \cdot T^3 \quad (3.32)$$

Таким образом модель Дебая сравнительно хорошо описывает зависимость  $C_V(T)$  и при низких температурах. Поэтому часто ее используют для приближенного вычисления вклада в теплоемкость от акустических ветвей дисперсионной зависимости фононов, особенно при очень низких температурах. Также ее используют для прогнозирования рассеяния излучений веществом, взаимодействия нейтронов и фотонов с фононами. Для каждого вещества подобрана по сопоставлению с опытными данными о его теплоемкости своя индивидуальная температура Дебая, приводимая в различных справочниках [5].

Для приближенной аппроксимации оптических ветвей дисперсионной зависимости фононов часто используют модель Эйнштейна или строят модели, похожие на рассмотренную модель Дебая, изменяя в ней зависимость  $\omega(\vec{k})$  и последующие математические вычисления.

В предыдущих разделах (3.1-3.3) кристалл рассматривался как совокупность невзаимодействующих осцилляторов. В этом случае потенциальная энергия возрастает пропорционально квадрату отклонения осциллятора от положения равновесия, а параметры, описывающие жесткость решетки не меняются при увеличении отклонений осцилляторов от положения равновесия. Это подход называют *гармоническим приближением*. Такие модели позволяют вычислить теплоемкость кристалла, но не позволяют вычислять многие другие параметры кристалла, связанные с взаимодействием фононов друг с другом, например теплопроводность. Заметим, что гармоническая модель не предусматривает взаимодействия осцилляторов - фононов друг с другом, так как они изначально выбираются как отвечающие нормальным, невзаимодействующим колебаниям. Как увидим далее, объяснение зависимости модулей упругости от температуры и теплового расширения требует учета *ангармонических поправок*, учитывающих отклонение от квадратичного закона изменения потенциальной энергии при отклонения осцилляторов от положения равновесия.

Тепловое расширение кристаллов. Все кристаллы (и жидкости, за очень малыми исключениями) при увеличении температуры в той или иной степени расширяются. Природа этого явления при детальном рассмотрении достаточно сложная. Считают, что тепловое расширение связано с увеличением средних расстояний между атомами кристалла, что может быть обусловлено многими причинами, в том числе асимметричной зависимостью

потенциальной энергии от смещения атомов из положения равновесия, изменениями величин сил взаимодействия между атомами при увеличении температуры, перегруппировками разных атомов, изменением преимущественных ориентаций их электронных облаков и некоторыми другими причинами. В данном разделе мы рассмотрим в основном первую причину, поскольку она как правило является самой главной и поскольку анализ других причин очень сложен для учебника.

Прежде всего отметим, что тепловое расширение не удастся объяснить в рамках рассмотренных в предыдущих разделах гармонических приближений, согласно которым возвращающая сила пропорциональна смещению атома из положения равновесия, а потенциальная энергия имеет квадратичную зависимость от смещения.

Рассмотрим реальную зависимость потенциальной энергии  $U(r)$  взаимодействия двух атомов от расстояния между ними (линия 1 на рис. 3.13), и эту же зависимость в случае гармонического приближения (линия 2 на рис. 3.13). В последнем случае при увеличении амплитуды колебаний атомов среднее расстояние между ними, совпадающее с минимумом потенциальной энергии и положением равновесия, не меняется, а значит и нет теплового расширения.

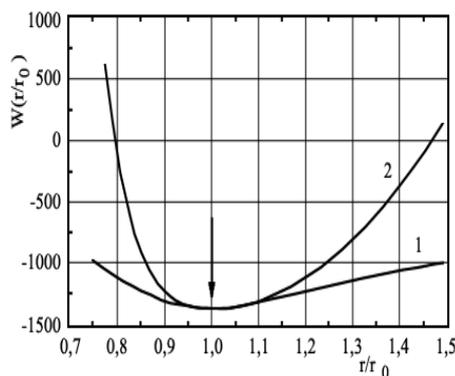


Рис. 3.13.

Зависимость потенциальной энергии  $U(r)$  взаимодействия двух атомов от расстояния  $r$  между ними в рамках различных приближений

Если же рассмотреть реальную зависимость  $U(r)$ , то видно, что из-за ее асимметрии при увеличении энергии (и амплитуды) колебаний, обусловленном увеличением температуры, среднее расстояние между атомами несколько увеличится. Степень этого увеличения определяется отклонением зависимости  $U(r)$  от симметричной. Чтобы учесть эту асимметрию, надо раскладывать  $U(r)$  в ряд, содержащий более высокие степени  $(r - r_0)$  чем  $(r - r_0)^2$ . Асимметрию обычно описывается членом, содержащим  $(r - r_0)^3$ .

$$U(r) = U(r_0) + c(r - r_0)^2 + g(r - r_0)^3 + \dots \quad (3.33)$$

Можно показать (см. Задачу 3.5), что при достаточно высоких температурах, когда справедливо классическое распределение Больцмана, учет последнего слагаемого в (3.33) позволяет получить, что

$$\langle r \rangle \approx r_0 + [3gk / (3c^2)]T \quad (3.34)$$

Этот результат соответствует часто используемым для прикладных расчетов эмпирическим законам о тепловом расширении тел при температурах вблизи комнатной:

$$l(T) = l_0(1 + \alpha(T - T_0)), \quad (3.35)$$

Здесь  $l_0$  - длина тела при  $T = T_0$ , а  $l(T)$  - длина тела при заданной температуре  $T$ .

Параметр  $\alpha$  называют коэффициентом линейного теплового расширения или просто *коэффициентом теплового расширения*, который в физике определяется как:

$$\alpha = (1/l)(dl/dT), \quad (3.36)$$

Разработано несколько простых и очень точных методов экспериментального определения  $\alpha$ . Самыми распространенными из них являются точное определение зависимости длины образца (дилатометрия) при его нагреве и определение температурной зависимости параметра решетки или же межплоскостного расстояния  $d(T) = \text{const} \cdot l(T)$  методами, рассмотренными в главе 1 (рентгеновская дилатометрия). По измеренной зависимости  $l(T)$  или  $d(T)$  по формуле (3.36) вычисляют  $\alpha$ .

Значения  $\alpha$  дают информацию о точности гармонического приближения для описания процессов колебаний атомов в данном веществе при разных температурах и о параметрах  $c$  и  $g$ , что важно для развития теории твердых тел. Кроме того, любая перестройка структуры вещества, любое изменение сил взаимодействия в веществе изменяют  $\alpha$ . Поэтому точное измерение  $\alpha(T)$  широко используется в физике и технике как простой метод определения температур фазовых переходов, подбора оптимальных термообработок, контроля состава и качества материалов и т.д. Такие исследования показывают, что можно считать  $\alpha$  независимым от температуры только в сравнительно небольших (порядка 100-200 К) диапазонах температур, в которых не происходит фазовых превращений. Заметим, что  $\alpha$  заметно изменяется в области низких температур (1-100 К) [6-8].

Величина  $\alpha$  для большинства веществ при  $T = 200 - 500 K$  имеет порядок  $10^{-5} K^{-1}$ . Параметр  $\alpha$  аномально мал и составляет менее  $10^{-6} K^{-1}$  для некоторых железо-никелевых, так называемых инварных, сплавов при  $T = 200 - 500 K$ , что широко используется в технике [6-8], когда надо изготовить деталь с минимально меняющимися при нагреве размерами, например маятник часов или заплавляемые в стекло контакты вакуумных ламп.

Заметим, что в случае квадратичной зависимости  $U(r)$  в (3.33) величина второй производной  $d^2U(r)/dr^2$ , равная  $2c$  и также равная параметру  $C$  формул (3.6), (3.11) имеет одно и то же значение при любых  $r$ . В случае реальной зависимости  $U(r)$ , изображенной на рис. 3.13, кривизна кривой а также связанные с ней величины  $d^2U(r)/dr^2$  и параметра "жесткости"  $C$  формул (3.6), (3.11), будут уменьшаться при возрастании  $r$ . Модули упругости, зависящие от  $C$ , при этом должны уменьшаться при увеличении среднего значения  $r$ , возрастающего при увеличении температуры. В этом - одна из главных причин уменьшения модулей упругости при увеличении температуры.

При распространении фононов в кристалле одни участки кристалла сжимаются, другие расширяются, при этом согласно рис. 3.13, в "сжатых" участках  $C$  оказывается больше, чем в "растянутых" - получается модуляция величины  $C$  упругими полями фонона. На такой модулированной решетке возможна дифракция частиц, движущихся в кристалле, приводящая к их дополнительному рассеиванию, уменьшению их длины свободного пробега и уменьшению теплопроводности вещества.

Теплопроводность кристаллов. Коэффициент теплопроводности  $\kappa$  определяется как количество тепловой энергии  $\Delta W$  переданное через единицу площади вещества за единицу времени  $\Delta t$  при единичном градиенте температуры  $dT/dx$  (см. рис. 3.14).

$$\Delta W = \Delta S \Delta t (dT/dx) \kappa \quad (3.37)$$

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

Экспериментальные данные для диэлектриков показывают, что  $\kappa$  увеличивается при повышении  $T$  от температуры абсолютного нуля;  $\kappa$  имеет при температуре 30-50 K размытый максимум и при дальнейшем увеличении температуры  $\kappa$  убывает. При

сравнительно высоких температурах (порядка температуры Дебая) коэффициент теплопроводности убывает как  $1/T$ .

Теоретическое объяснение такой зависимости в диэлектриках основано на предположении, что в диэлектриках энергию переносят фононы, которые как упругие волны движутся в идеальной решетке свободно и меняют направление своего движения лишь при взаимодействии с несовершенствами кристаллической решетки. Такими несовершенствами могут быть границы зерен или блоков, другие дефекты кристаллической структуры, неоднородные деформации кристаллической решетки, приводящие к модуляции упругих свойств кристаллической решетки.

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  $\lambda$ . Тогда, согласно изложенным в начале этого раздела рассуждениям, в кристалле появится модуляция упругих постоянных с таким же периодом модуляции, напоминающая дифракционную решетку (см. рис. 3.1). Вторым фононом, 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 (см. том 2):

$$\kappa = C_V \langle v \rangle l_{\text{eff}} \quad (3.38)$$

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);  $l_{\text{eff}}$  - эффективная длина свободного пробега молекул газа (у нас - бозонов).

Величина  $l_{\text{eff}}$  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 (см. рис. 3.15 а) слабее влияют на перенос теплоты и величину  $l_{\text{eff}}$ , чем процессы, приводящие к сильной переориентации направления движения частицы (см. рис. 3.15 б).

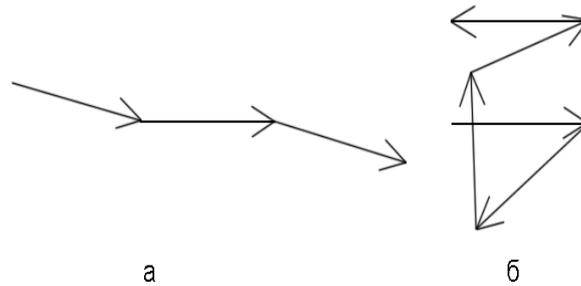


Рис. 3.15.

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  $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3 + \vec{k}_4$  (см. также рис. 3.16), при которых выполняется закон сохранения энергии и импульса фононов, также оказывают малое влияние на уменьшение величины  $\kappa$ . Их принято называть *нормальными процессами* (или *N- процессами*).

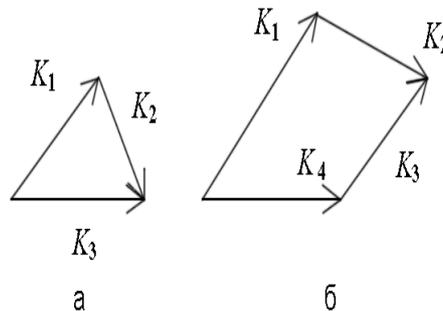


Рис. 3.16.

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  $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3 + \vec{G}$  (см. также рис. 3.17), где  $\vec{G}$  (вектор обратной решетки, для которых закон сохранения импульса в обычной записи (без учета вектора  $\vec{G}$ ) не выполняется).

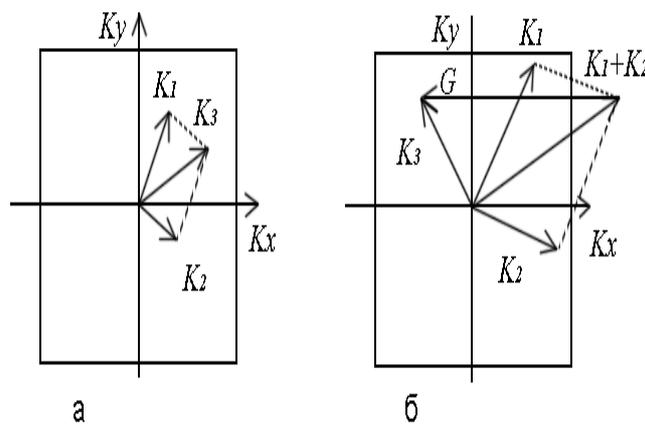


Рис. 3.17.  
Схема процесса переброса

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  $\vec{k}_3$  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. Такая вероятность пропорциональна их числу, или температуре  $T$ , поскольку при высоких температурах согласно разделу 3.3, число фононов пропорционально температуре. 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  $T^3$  (см. раздел 3.3) 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  $l_{\phi}$  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  $l_{\phi}$  определится в основном концентрацией дефектов, не зависящей от температуры. В этом случае можно считать, что  $l_{\phi}$  не зависит от температуры, а  $C_v(T)$  пропорциональна  $T^3$ . Тогда  $\kappa(T)$  пропорционален  $T^3$ , что наблюдается экспериментально.

Таким образом удастся теоретически объяснить зависимость коэффициента теплопроводности  $\kappa(T)$  от температуры, изображенную на рис. 3.18. Главными ее особенностями являются наличие максимума при температурах 20-50 К и уменьшение  $\kappa(T)$  как при высоких, так и при низких температурах.

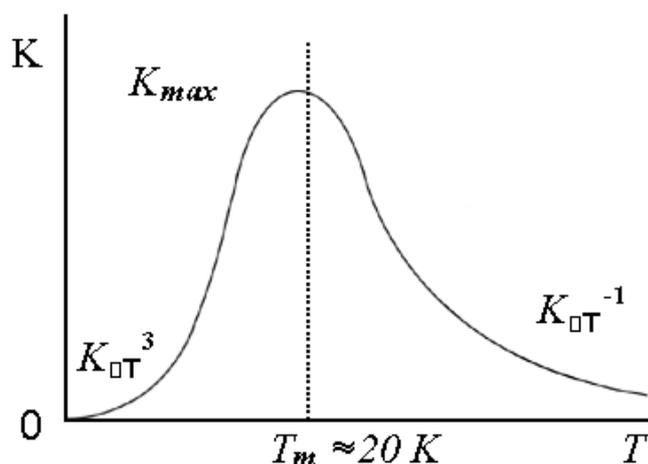


Рис. 3.18.

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. Подробнее о вкладе электронов проводимости в теплопроводность можно прочитать в [1].

### Литература к теме 3

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука, 1978, 790 с.
2. Каганов М.И. Электроны, фононы, магноны. - М.: Наука.- 1979. - 192 с.
3. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. - М.: Мир. - 1966. - 568 с.
4. Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хеннинг К. Нейтронная спектроскопия. М.: Атомиздат, 1979. 344 с.
5. Физические величины. Справочник. Под ред. Григорьева И.С. и Мейлихова Е.З.. - М.: Энергоатомиздат.- 1991.- 1232 с.
6. Прецизионные сплавы. Справочник. Под ред. Молотилова Б.М. . - М.: Metallurgy.- 1983.- 440 с.
7. Материаловедение. Под ред. Арзамасова. - М.: Машиностроение.- 1986.- 384 с.
8. Захаров А.И. Физика прецизионных сплавов с особыми тепловыми свойствами. - М.: Metallurgy.- 1986.- 240 с.

### Тема 4. Электрические свойства кристаллов

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. На вид этого распределения сильное влияние оказывает периодическое расположение в пространстве атомов вещества, формирующих в пространстве трехмерный периодический потенциал, в поле которого движутся электроны.

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. Подобным образом уровни атома расщепляются под воздействием внешнего магнитного поля (эффект Зеемана). В таком случае взаимодействие атомов друг с другом незначительно изменяет картину энергетических уровней электронов изолированного атома.

В рамках приближения почти свободных электронов считают, что электрон движется "почти свободно" в слабом потенциале ионных остовов, который рассматривают как малое возмущение. В таком случае кинетическая энергия электрона намного превосходит энергию взаимодействия этого электрона с ионами. В настоящее время это самый удачный подход, как с научной, так и с методической точки зрения, поскольку позволяет наглядно объяснить почти все важные для практики и наблюдаемые на опыте закономерности и эффекты.

В этой главе мы рассмотрим и приближение сильной связи, и модель Кронига-Пенни, но главный упор будет сделан именно на приближение почти свободных электронов.

**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. 4.1). Ясно, что такая форма потенциальных барьеров далека от реального потенциала ионных остовов, схематически изображенной на рис. 4.1 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. 4.1). 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).

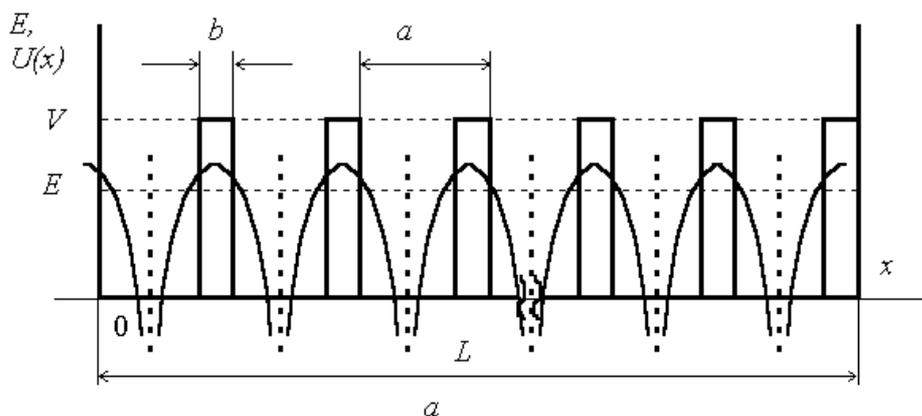


Рис. 4.1а.

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

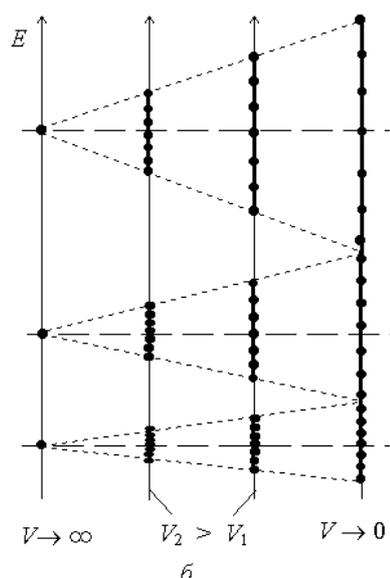


Рис. 4.1б.  
 Вид потенциальной энергии в рамках модели Кронига-Пенни (а) и схематическое распределение разрешенных значений энергии  $E$  по шкале энергии (б).

Интересно проследить, как меняется распределение электронов по уровням при увеличении высоты и ширины потенциальных барьеров на рис. 4.1 (а).

При отсутствии барьеров задача аналогична задаче о движении электрона в одномерной потенциальной яме шириной  $L$  с периодическими граничными условиями для волновой функции  $\Psi$ . Эта задача была рассмотрена в теме 5. Распределение значений энергии электрона по шкале показано на рис. 4.1 (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. 4.1 (б); разрешенные значения - изолированы друг от друга.

При промежуточных значениях высот и ширин барьеров на рис. 4.1 (а) значения  $E$  вычисляются приближенными методами [1]. Разрешенные значения распределены в таких случаях как на рис. 4.1 (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 (см. [разд. 3.4](#)). В таком случае зависимость энергии уровней атомов в зависимости от расстояния между ними будет иметь вид схематически изображенный на рис. 4.2. Очевидно, что наибольшему расщеплению подвергнутся уровни, соответствующие внешним валентным электронам.

По рис. 4.2 рисунку видно, что общее число состояний электронов, отвечающих невырожденному уровню и принадлежащих  $N$  атомам, как изолированным, так и

сформировавшим кристалл, сохраняется и оказывается равным  $2N$  (двойка появляется из-за учета спина электрона, из-за чего каждому невырожденному уровню отвечают два состояния - с разной ориентацией спина электрона). Таким образом, число состояний в одной зоне оказывается равным  $2N$ .

Число состояний, отвечающих одному уровню изолированного атома, может быть равно не двум, а большему числу в случае вырождения этого уровня (как это происходит в случае  $P$ -состояний атома водорода). Тогда общее число состояний окажется равным  $2N$ , умноженному на кратность вырождения этого уровня изолированного атома, то есть кратным  $2N$ .

Взаимодействие между атомами, если оно значительно, может привести к перекрытию двух отдельных зон, в таком случае получится одна зона с числом электронных состояний равным сумме этих состояний в перекрывшихся зонах. И в этом случае число электронных состояний окажется кратным  $2N$ .

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.

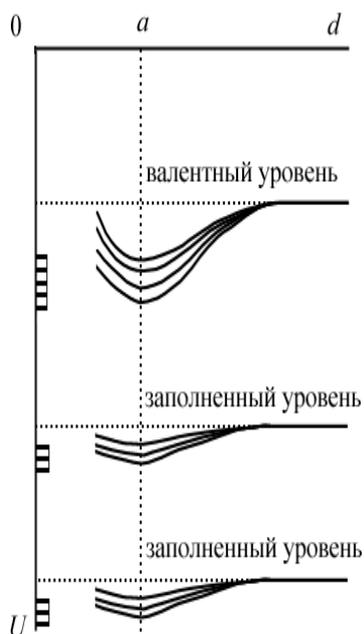


Рис. 4.2.

Зависимость энергии уровней атомов в зависимости от расстояния  $d$  между ними.

В качестве первого приближения для описания поведения электронов в кристалле полем ионных остовов пренебрегают и используют модель электронного Ферми-газа, подробно рассмотренную в томе 6 данного курса. 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  $L$  (см. том 5). В случае периодических граничных условий для волновой функции  $\Psi$  система электронных состояний имеет допустимые

значения волнового вектора  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ :

$$k_x = 2\pi n_1 / L; \quad k_y = 2\pi n_2 / L; \quad k_z = 2\pi n_3 / L; \quad (4.1)$$

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:

$$\Psi = A \exp(i\vec{k} \vec{r}), \quad (4.2)$$

где  $A = (2\pi / L)^{3/2}$

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

$$E = p^2 / 2m = (\hbar k)^2 / 2m = (\hbar^2 / 2m)(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (4.3)$$

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:

$$E_F = (\hbar^2 / 2m)(3\pi^2 n)^{2/3} \quad (4.4)$$

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

$$f(E) = 1 / \{ \exp((E - E_F) / kT) + 1 \} \quad (4.5)$$

График этой функции при различных температурах приведен на рис. 4.3.

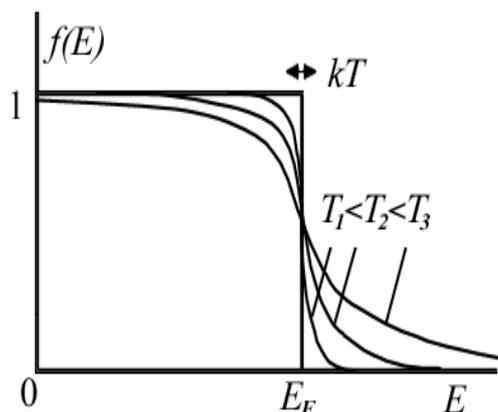


Рис. 4.3.

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:

$$E_F(T) = E_F(0) \{ 1 - (\pi^2 / 12)(kT / E_F(0))^2 \} \quad (4.6)$$

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:

$$U(x + an_1, y + bn_2, z + cn_3) = U(x, y, z) \quad (4.7)$$

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 (4.2) при появлении периодического поля с потенциальной энергией вида (4.7) изменяется в соответствии с формулой:

$$\Psi = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (4.8)$$

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 (см. разд. 1.3). Для наглядности рассмотрим простую кубическую кристаллическую решетку с периодом  $a$ . Пусть электрон движется по направлению  $[100]$  и имеет волновой вектор  $\vec{k} = (k; 0; 0)$  (см. рис. 4.4 а). Если бы мы пренебрегли полями ионных остовов, то получили бы квадратичную зависимость энергии от волнового вектора, изображенную на рис. 4.4 (б).

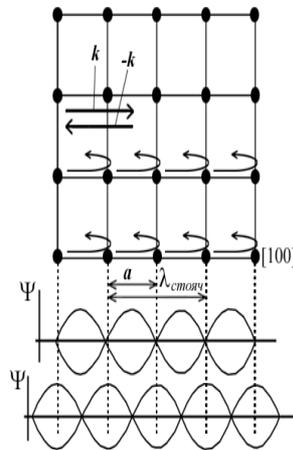


Рис. 4.4а.

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)

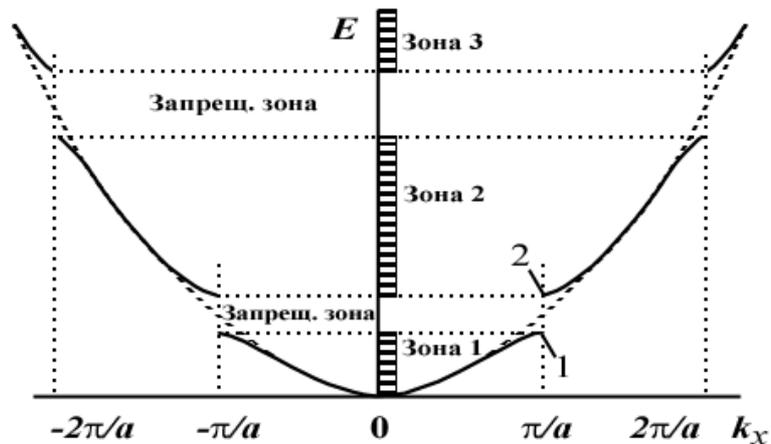


Рис. 4.4б.

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  $\lambda_E = 2\pi \hbar / P = 2\pi / k$ . При  $\lambda_E = 2a$  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 (см. рис. 4.4 а). 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).

Известно, что с квадратом модуля волновой функции электрона связана плотность вероятности обнаружения электрона и средняя электронная плотность в кристалле. Очевидно, что при расположении пучностей стоячей волны (и волновой функции электрона, и максимумов электронной плотности) в месте ионов кристаллической решетки кулоновская энергия взаимодействия отрицательно заряженного электронного облака с положительно заряженными ионами будет меньше, чем при расположении пучностей стоячей волны между

ионами кристаллической решетки. Таким образом при  $k = \pi / a$  должно наблюдаться не одно, а два существенно различных значения функции  $E(k)$ . Учтя непрерывность  $E(k)$  при всех остальных значениях  $k$ , можно схематически провести график зависимости  $E(k)$ , как на рис. 4.4 б.

Этот результат можно обобщить и на электроны с волновым вектором не параллельным [100] (см. рис. 4.4 а). Тогда при попадании конца вектора  $\vec{k}$  на границу зоны Бриллюэна, согласно (1.20), будет выполняться условие Вульфа-Брегга (1.19), и будет формироваться интенсивная отраженная волна. В этом случае можно показать, что произойдет формирование стоячих волн, аналогичное рассмотренному выше, а это приведет к разрыву зависимости  $E(\vec{k})$  при попадании конца вектора  $\vec{k}$  на границу зоны Бриллюэна.

Таким образом, на границе зоны Бриллюэна должен наблюдаться разрыв зависимости  $E(\vec{k})$ .

Как было показано в разд. 3.3, число состояний в зоне Бриллюэна равно  $2N$  (при учете спина электрона). Оно равно числу состояний в энергетической зоне.

Заметим, что точке 1 на рис. 4.4 б соответствуют состояния электронов с наибольшей электронной плотностью вблизи ионного остова; близкую к этой форму имеют состояния  $S$ -электронов изолированных атомов. Таких состояний у коллектива  $N$  изолированных атомов будет  $2N$ , что в точности соответствует числу состояний в зоне Бриллюэна. Точке 2 на рис. 4.4 (б) соответствуют состояния электронов с наименьшей электронной плотностью вблизи ионного остова, близкую к этой форму имеют состояния  $P$ -электронов изолированных атомов. Считают, что точке разрыва функции  $E(k)$  соответствует окончание заполнения состояний, напоминающих  $S$ -состояния, и начинается заполнение состояний близких к  $P$ -состояниям. Энергии этих состояний должны заметно отличаться.

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, согласно (4.3), 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:

$$\delta x \delta p_x \geq \hbar / 2. \quad (4.9)$$

В таком случае можно говорить о нахождении электрона в некоторой области пространства размера порядка  $\delta x$ , 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:

$$\Psi = A \exp(ikr), \quad (4.10)$$

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

$$v_g = (\partial \omega / \partial k) = (\partial E / \partial p) = (1 / \hbar)(\partial E / \partial k) \quad (4.11)$$

Эта скорость и характеризует процесс перемещения волнового пакета и связанной с ним области пространства, где вероятность встретить электрон будет наибольшей. На рис. 4.4 групповая скорость соответствует тангенсу наклона касательной (умноженному на  $\hbar$ ) к графику зависимости  $E(k)$ . 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 (см. рис. 4.4 б).

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 [2].

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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_g}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left( (1/\hbar) \frac{\partial E}{\partial k} \right) = (1/\hbar) \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \frac{\partial k}{\partial t} = \\ &= (1/\hbar^2) \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \frac{\partial p}{\partial t} = (1/\hbar^2) \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) F \end{aligned} \quad (4.12)$$

Эту формулу можно переписать в виде:

$$\frac{\partial v_g}{\partial t} m_* = F \quad (4.13)$$

Она аналогична второму закону Ньютона:

$$\frac{\partial v}{\partial t} m_* = F \quad (4.14)$$

если положить что:

$$m_* = \hbar^2 / \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) \quad (4.15)$$

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, согласно (4.15), различные значения для разных волновых векторов электрона. При малых значениях модуля  $k$  (см. рис. 4.4 б), 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; движение дырок будет рассмотрено в [разд. 4.4](#), посвященном полупроводникам.

Точке перегиба на рис. 4.4 (б) соответствует согласно (4.15) бесконечно (или же очень) большая эффективная масса. Такой электрон практически не меняет своей скорости под влиянием внешней силы.

Для большей части электронов эффективная масса как правило положительна. В частности, она положительна у всех электронов, если зона заполнена наполовину или менее (см. рис. 4.4 б). 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 (см. рис. 4.5). Не заполненная зона соответствует случаю полупроводников и диэлектриков, а частично заполненная зона соответствует случаю проводников. Рассмотрим по отдельности оба эти случая.

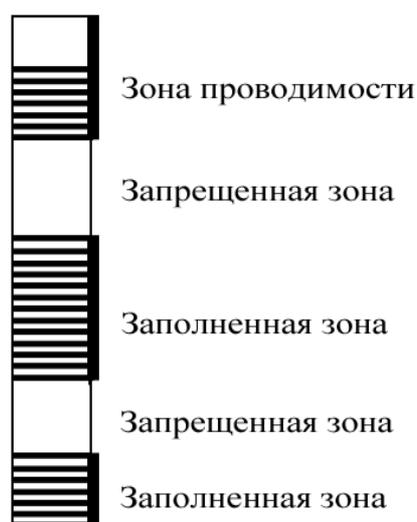


Рис. 4.5.

Схема заполнения энергетических зон в веществе

Случай проводников. Если зона проводимости заполнена частично, то занятые состояния в ней будут находиться под поверхностью Ферми, которая согласно [разд. 4.1](#)

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 (см. рис. 4.6). Ситуация изменится, если приложить электрическое поле и связанную с ним внешнюю силу  $\vec{F}$  (см. рис. 4.6): 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 (см. рис. 4.6). 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 диэлектриков. Если зона проводимости заполнена полностью, то занятые состояния в ней будут полностью заполнять зону Бриллюэна, которая согласно [разд. 4.1](#) имеет центр симметрии; ближайшие незанятые состояния будут находиться уже в следующей зоне и отделены от занятых состояний по энергии на величину  $E_g$  (см. рис. 4.7). В таком случае, как и в случае проводников, электрону с любым волновым вектором  $\vec{k}^+$  будет соответствовать электрон с волновым вектором  $-\vec{k}^+$ . Оба эти электрона будут обладать суммарным нулевым импульсом и не будут давать вклад в перенос заряда и формирование электрического тока (см. рис. 4.7).

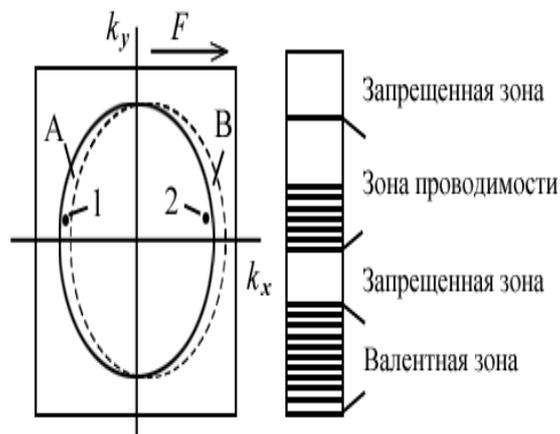


Рис. 4.6.

Перераспределение электронов по состояниям под влиянием внешнего электрического поля

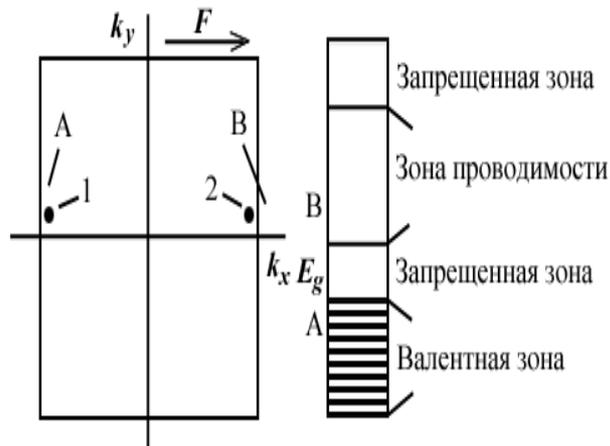


Рис. 4.7.

Невозможность перераспределения электронов под влиянием внешнего электрического поля в случае полностью заполненной зоны (случай диэлектрика)

Ситуация не изменится, если приложить внешнее электрическое поле и связанную с ним внешнюю силу  $\vec{F}$  (см. рис. 4.7). Электронам не удастся перегруппироваться, как на рис. 4.6, так как для этого они должны покинуть состояния А и занять состояния В с энергией на  $E_g$  большей. Энергии теплового движения порядка  $kT$  не хватает для такой перегруппировки. Поэтому перегруппировки электронов по состояниям, обеспечивающей появление электрического тока, не происходит. Таким образом, полностью заполненная зона не будет давать вклад в электропроводность вещества. Такие вещества, называемые *диэлектриками*, очень плохо проводят электрический ток.

Случай полупроводников. Если в предыдущем случае (диэлектрика) ширина запрещенной зоны не слишком велика, а составляет, например,  $10kT$ , то часть электронов в результате теплового движению 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, как это показано на рис. 4.6. Однако, поскольку электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне мало, такое вещество, называемое *полупроводником*, будет сравнительно плохо проводить электрический ток.

На рис. 4.8 приведены схематические картины заполнения зон электронами в случае проводников, диэлектриков и полупроводников.

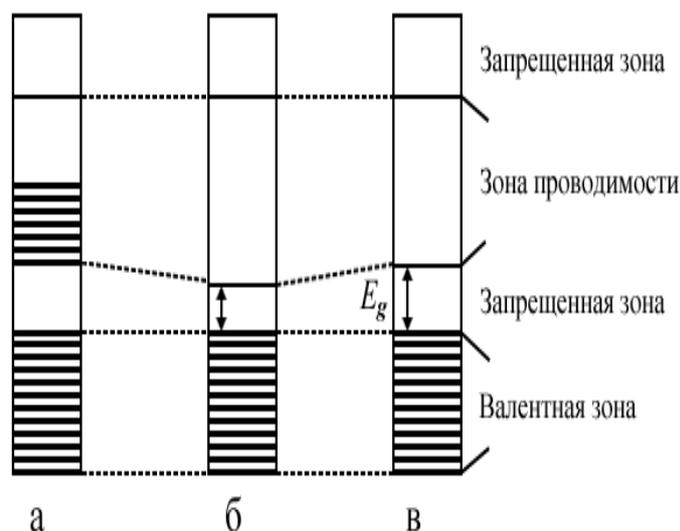


Рис. 4.8.

Заполнение зон электронами в случае проводников, диэлектриков и полупроводников

Электропроводность проводников следовало бы рассматривать с позиций квантовой механики, однако, это - сложная для вводного курса задача. Поэтому воспользуемся полуклассическим подходом для вычисления электропроводности проводников.

Рассмотрим проводник, у которого при отсутствии внешнего электрического поля занятые состояния электронов в  $k$ -пространстве будут ограничены поверхностью Ферми, которую для простоты будем считать сферой, не пересекающей границы первой зоны Бриллюэна (см. рис. 4.9).

При появлении внешнего поля  $\vec{E}$  на электроны будет действовать сила  $\vec{F} = e\vec{E}$ . Они начнут ускоряться в соответствии со вторым законом Ньютона:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} m = \vec{E} e \quad (4.16)$$

Электроны через время  $\tau$  приобретут дополнительную скорость:

$$\vec{v} = \vec{E} e \tau / m \quad (4.17)$$

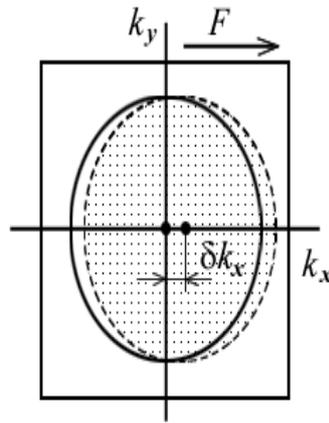


Рис. 4.9.

*Изменение распределения электронов по состояниям при воздействии на проводник внешней силой со стороны электрического поля*

Можно считать, что распределение электронов по состояниям, изображенное на рис. 4.9, как бы сместиться на некоторое расстояние. Очевидно, что через достаточно большое время скорость электронов и смещение распределения электронов на рис. 4.9 могут стать очень большими. Однако, необходимо учитывать столкновения электронов как друг с другом, так и с различными препятствиями.

Совершенная кристаллическая решетка, согласно [разд.4.1](#), 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 (см. [разд. 3.1](#)), и электрон отклоняется искаженным ее участком.

К *статическим дефектам* относятся все дефекты кристаллической решетки, рассмотренные в главе 2; 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.

Из-за столкновений электрон будет ускоряться какое-то среднее время  $\tau$ , называемое *временем релаксации*, после чего произойдет столкновение, скорость электрона изменится и примет случайное, в среднем равное нулю значение. За время до столкновения электрон приобретет среднюю скорость направленного движения, называемую *дрейфовой скоростью*, равную:

$$\langle \vec{v} \rangle = \vec{E} e \tau / 2m. \quad (4.18)$$

Это обеспечит протекание тока плотности:

$$\vec{j} = n \langle \vec{v} \rangle e = \vec{E} e^2 n \tau / 2m. \quad (4.19)$$

Вспомнив закон Ома:  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ , получаем для коэффициента электропроводности  $\sigma$  выражение:

$$\sigma = e^2 n \tau / 2m. \quad (4.20)$$

Для удельного сопротивления получается выражение:

$$\rho = 1 / \sigma = 2m / (e^2 n \tau) = 2m \nu / (e^2 n). \quad (4.21)$$

Через  $\nu = 1 / \tau$  обозначена средняя частота столкновений электрона.

Для анализа зависимости  $\rho(T)$  необходимо рассмотреть зависимость  $\nu = 1 / \tau$  от температуры и концентрации дефектов.

Можно считать, что динамические и статические дефекты при не слишком больших их концентрациях воздействуют на движущиеся электроны независимо друг от друга. Тогда можно считать частоту столкновений электрона с дефектами состоящей из двух слагаемых:

$$\nu = \nu_{\text{стат}} + \nu_{\text{дин}}. \quad (4.22)$$

Первое слагаемое не зависит от температуры. Второе слагаемое зависит: во-первых, от концентрации фононов и от механизмов столкновений электронов с фононами, во-вторых, от столкновений электронов друг с другом.

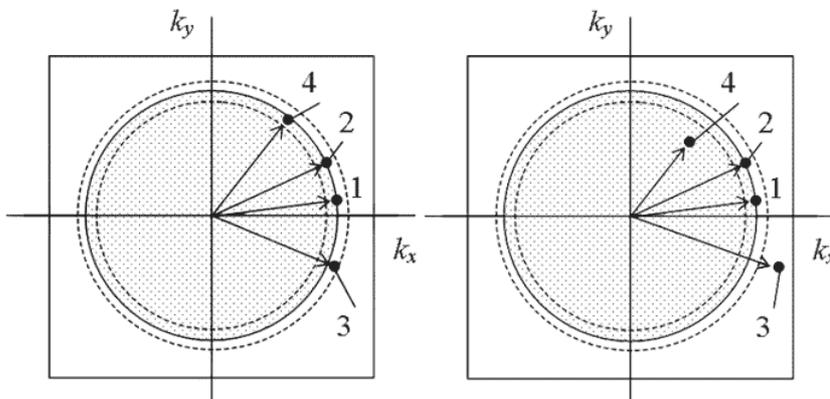


Рис. 4.10а.

Схема столкновений двух электронов друг с другом. Стрелками обозначены волновые векторы двух электронов до (1 и 2) и после (3 и 4) столкновения друг с другом

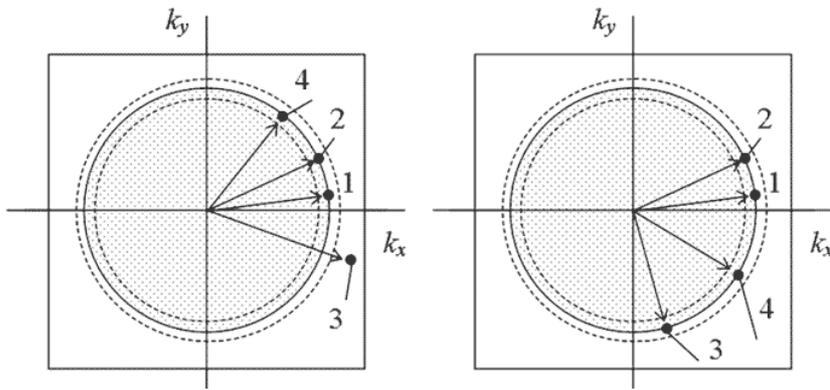


Рис. 4.10б.

Схема столкновений двух электронов друг с другом. Стрелками обозначены волновые векторы двух электронов до (1 и 2) и после (3 и 4) столкновения друг с другом

При столкновениях электронов друг с другом необходимо учитывать законы сохранения энергии, импульса и принцип Паули. Принцип Паули приводит к дополнительным значительным ограничениям на волновые векторы электронов после столкновения: электрон должен оказаться в состоянии, не занятом другими электронами. Как уже отмечалось выше, при всех температурах до температур плавления в проводниках заняты (с вероятностью очень близкой к единице) практически все состояния с энергией меньшей энергии Ферми на величину порядка нескольких  $kT$ . Таких занятых состояний, находящихся на рис. 4.10 внутри самой малой сферы, - значительное большинство, и именно в них не может оказаться электрон после столкновения; из-за чего столкновения не происходят, даже если они разрешены законами сохранения энергии и импульса.

Процессы, изображенные на рис. 4.10а (слева), возможны, так как для них выполнены закон сохранения энергии и импульса и обеспечено выполнение принципа Паули). Процессы, изображенные на рис. 4.10а (справа), - невозможны, поскольку состояние 4 занято и электрон после столкновения не может в нем оказаться. Крайне маловероятны и процессы изображенные на рис. 4.10б (слева), хотя состояния 3 и 4 свободны; для их осуществления потребуется дополнительная энергия намного превосходящая  $kT$  (суммарная энергия электронов в состояниях 3 и 4 значительно превосходит суммарную энергию электронов в состояниях 1 и 2). Поэтому в процессах столкновений участвуют только электроны, волновые векторы которых находятся только в очень тонком слое вблизи поверхности Ферми (см. рис. 4.10а (слева)). И из этой малой доли электронов не все смогут сталкиваться из-за ограничений, налагаемых законом сохранения импульса. Например, столкновения электронов с волновыми векторами, отмеченными на рис. 4.10б (справа), невозможны из-за невыполнения закона сохранения импульса. По этим причинам электроны, находящиеся в металле на малых расстояниях порядка межатомных и быстродвигающиеся, сталкиваются тем не менее сравнительно редко. Результатом этого является очень большая длина

свободного пробега электронов, достигающая (см. задачу 4.3) иногда десятков и сотен тысяч межатомных расстояний. Как показывают расчеты и анализ опытных данных, столкновения электронов с фононами - более частые, чем электронов с электронами.

Рассмотрим поэтому подробнее столкновения электронов с фононами, поскольку они более частые и обеспечивают главный вклад в электросопротивление. Число фононов при температурах порядка комнатной пропорционально температуре (см. [разд. 3.3](#)); поэтому считают, что частота столкновений электронов с фононами пропорциональна температуре. Согласно (4.22) вклад в электросопротивление от динамических дефектов окажется также пропорциональным температуре.

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. Показать это можно, рассмотрев функцию занятости состояний (4.5) в случае сравнительно узкой запрещенной зоны (см. рис. 4.12). На нем штриховкой отмечены занятые электронами состояния. Проанализировав зависимости, изображенные на рис. 4.12, можно сделать 2 вывода.

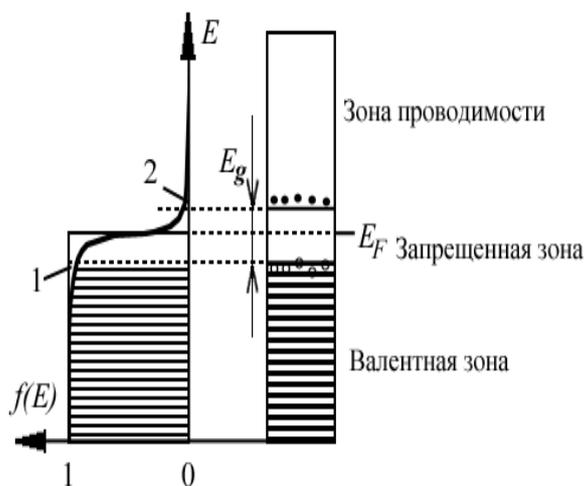


Рис. 4.12.

*Распределение электронов по состояниям в полупроводнике*

Первое, поскольку число электронов в зоне проводимости должно равняться числу дырок в валентной зоне, то площади 1 и 2 должны быть приблизительно равны (с малыми поправками на величины эффективных масс электрона и дырки и трехмерное распределение состояний в пространстве волновых векторов). Это достигается, если уровень Ферми совпадает с серединой запрещенной зоны. Это утверждение можно доказать и более строго (см. [1, 2, 3]).

Второе, так как  $(E - E_F) \gg kT$ , то формула (4.5) для вычисления вероятности встретить электрон в зоне проводимости (и дырки в валентной зоне) превращается в распределение Больцмана:

$$f(E) = 1 / \{ \exp((E - E_F) / kT) + 1 \} \approx \approx Const \cdot \exp(-(E - E_F) / kT). \quad (4.23)$$

Это позволяет при описании поведения электронов и дырок использовать классические подходы. Величину  $E$  удобно отсчитывать от верхнего края валентной зоны, что мы и будем подразумевать при дальнейшем изложении.

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. 4.13) и превращению его в "свободно перемещающийся" по кристаллу электрон.

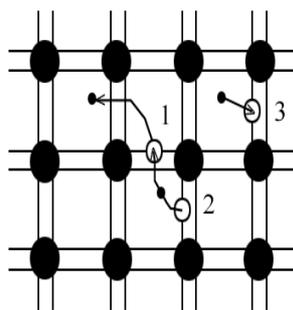


Рис. 4.13.

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 (см. рис. 4.13). 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 (см. рис. 4.13 (3)). 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. Вероятность образования пары электрон - дырка с минимальной энергией (очевидно, такая пара получается если электрон проводимости обладает наименьшей энергией, а дырка - наибольшей (см. рис. 4.14)) будет максимальной согласно (4.23). Именно такие пары в основном образуются при температуре порядка  $10kT$  и дают основной вклад в концентрацию  $n$  свободных носителей заряда.

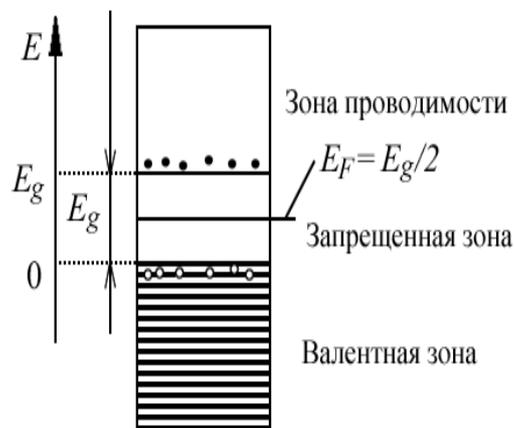


Рис. 4.14.

Энергетические уровни в беспримесном полупроводнике

Тогда можно приближенно записать, что:

$$n(T) = n_0 \exp((E_g / 2 - E) / kT) = n_0 \exp(-E_g / 2kT) \quad (4.24)$$

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

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-E_g / 2kT) \quad (4.25)$$

Этот закон подтверждается экспериментально (см. рис. 4.15). Тангенс наклона прямой линии на этом рисунке связан с шириной запрещенной зоны беспримесного полупроводника.

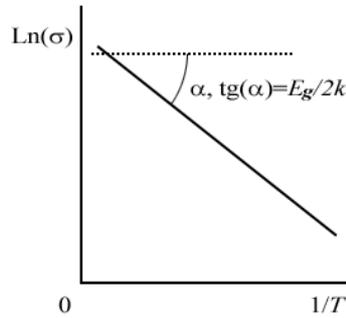


Рис. 4.15.

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:

$$\vec{j} = n_e \vec{v}_e + n_h \vec{v}_h. \quad (4.26)$$

Здесь через  $\vec{v}_e$  и  $\vec{v}_h$  обозначены дрейфовые скорости электронов и дырок. Сопоставляя закон Ома в дифференциальной форме  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$  с формулами (4.26) и (4.19), получаем, что  $\vec{v}_e$  и  $\vec{v}_h$  пропорциональны  $\vec{E}$ . Удобно ввести новую величину - подвижность носителя электрического тока  $\mu$  с помощью соотношения:

$$\vec{v} = \mu \vec{E}. \quad (4.27)$$

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 (см. к примеру, раздел, посвященный эффекту Холла). В частности соотношение (4.26) можно переписать в виде:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E}. \quad (4.28)$$

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.

Получившийся после добавления акцепторных примесей полупроводник называют *акцепторным полупроводником*. Его также называют дырочным (так как в нем - избыток свободных дырок) или же полупроводником *P*-типа: от слова *positive* - положительный, поскольку в нем - избыток положительных свободных носителей заряда.

Донорные полупроводники - получают при добавлении в полупроводник элементов, от которых легко "отрывается" электрон. Например, если к четырехвалентному кремнию (или германию) добавить пятивалентный мышьяк (или фосфор), то последний использует свои 4 валентных электрона для создания 4 валентных связей в кристаллической решетке, а пятый электрон окажется "лишним", такой электрон легко отрывается от атома и начинает относительно свободно перемещаться по кристаллу. В таком случае в кристалле образуется избыток свободных электронов. Не следует забывать и об образовании пар электрон - дырка, как это рассматривалось в случае беспримесного полупроводника, однако для этого требуется значительно большая энергия, и поэтому вероятность такого процесса при комнатных температурах достаточно мала в соответствии с (4.23). Электроны в донорном полупроводнике принято называть *основными носителями заряда*, а дырки - *неосновными носителями заряда*.

На языке зонной теории появление "легко отрывающихся" электронов соответствует появлению в запрещенной зоне донорных уровней вблизи нижнего края зоны проводимости (см. рис. 4.16). Электрону для перехода в зону проводимости с такого уровня требуется меньше энергии, чем для перехода из валентной зоны (см. рис. 4.16), чему соответствует уход электрона из обычной ковалентной связи.

При температурах порядка комнатной основной вклад в проводимость полупроводника будут давать электроны, перешедшие в зону проводимости с донорных уровней, вероятность же перехода электронов из валентной зоны будет очень мала.

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.

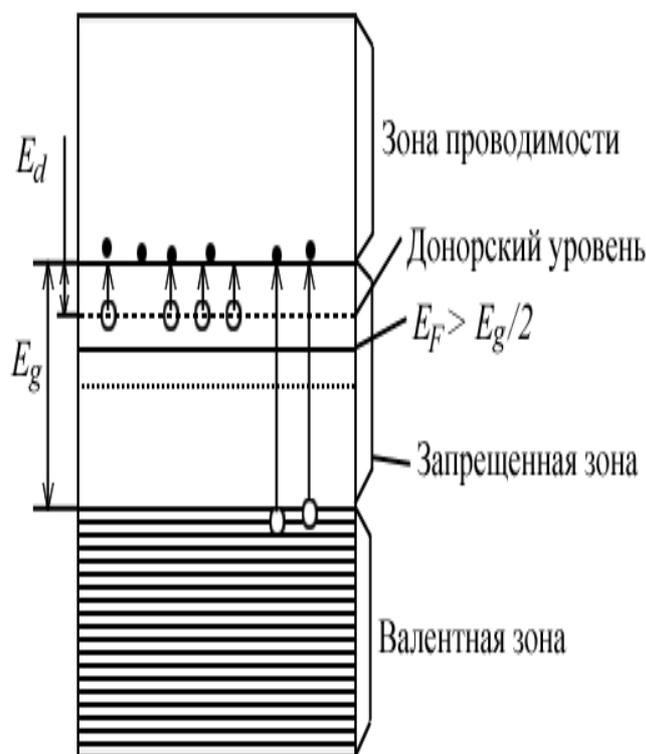


Рис. 4.16.

Схема электронных состояний донорного полупроводника

Можно показать [1, 2, 3], 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.

Акцепторные полупроводники - получают при добавлении в полупроводник элементов, которые легко "отбирают" электрон у атомов полупроводника. Например, если к

четырёхвалентному кремнию (или германию) добавить трехвалентный индий, то последний использует свои три валентных электрона для создания трех валентных связей в кристаллической решетке, а четвертая связь окажется без электрона. Электрон из соседней связи может перейти на это пустое место, и тогда в кристалле получится дырка (см. рис. 4.13). В таком случае в кристалле образуется избыток дырок. Не следует забывать и об образовании пар электрон - дырка, как это рассматривалось в случае беспримесного полупроводника, однако вероятность этого процесса при комнатных температурах достаточно мала. Дырки в акцепторном полупроводнике принято называть основными носителями, а электроны - неосновными.

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. 4.17). 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 (см. рис. 4.17), то есть для "полного ухода" электрона из ковалентной связи.

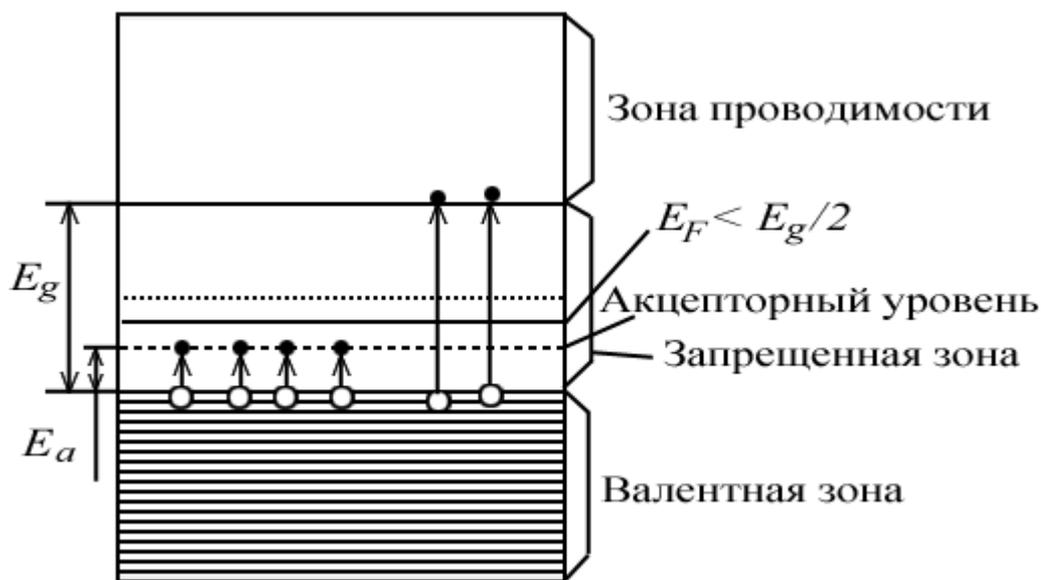


Рис. 4.17.

*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 [1, 2, 3], 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.

Итак, при постепенном увеличении температуры наблюдается постепенное превращение как донорного, так и акцепторного полупроводника в полупроводник аналогичный беспримесному, а затем - в полупроводник аналогичный по проводимости проводнику. В этом заключается причина отказа при перегреве полупроводниковых устройств, состоящих из нескольких областей полупроводников донорного и акцепторного типов. При увеличении температуры различия между областями постепенно пропадают и в итоге полупроводниковое устройство превращается в монолитный кусок хорошо проводящего ток полупроводника.

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*.

Ширину запрещенной зоны вычисляют по найденной экспериментально красной границе внутреннего фотоэффекта - максимальной длине волны излучения  $\lambda_k$ , при которой

возможен внутренний фотоэффект. Для этого используют соотношение:

$$E_g = \hbar\omega_k = 2\pi\hbar c / \lambda_k \text{ (см. задачу 4.4).}$$

Среднее время жизни носителей в полупроводнике вычисляют по найденной экспериментально зависимости проводимости полупроводника при облучении его светом (см. рис. 4.18). Рассмотрим беспримесный полупроводник при комнатной температуре. При отсутствии освещения в нем будет равновесная концентрация носителей заряда  $n_T$ ; с ней связана проводимость  $\sigma_T$  (см. рис. 4.18).

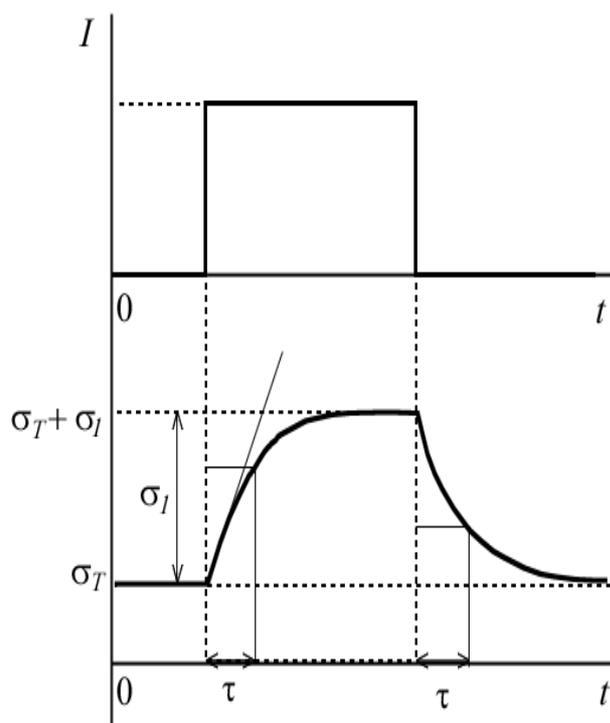


Рис. 4.18.

Зависимость равновесной концентрации носителей заряда  $n = n_T + n_I$  и связанной с ней проводимости  $\sigma = \sigma_T + \sigma_I$  от освещения полупроводника

При освещении полупроводника будут рождаться пары электрон - дырка. Этот процесс скоро уравнивается рекомбинацией электронов и дырок, вероятность которой растет при увеличении концентраций последних. Через некоторое время скорость рекомбинации сравняется со скоростью рождения электронов и дырок. При этом в полупроводнике установится новое значение концентрации электронов и дырок:  $n = n_T + n_I$  (см. рис. 4.18). Если теперь свет мгновенно выключить, то концентрации электронов и дырок

постепенно из-за рекомбинации вернутся к значению  $n_T$ , которое наблюдалось до освещения полупроводника (см. рис. 4.18). Аналогичным образом будет изменяться

проводимость полупроводника. Время  $\tau$ , за которое добавка к проводимости  $\sigma_I$  уменьшится приблизительно в 2,7-раза (см. рис. 4.18), называют средним временем жизни электронов и дырок в полупроводнике. Такие быстрые изменения проводимости удобно наблюдать на экране осциллографа, обеспечив периодическое включение - выключение потока света и синхронный запуск развертки осциллографа (см. также задачу 4.5).

Эффект Холла в полупроводниках. Рассмотрим образец полупроводника в виде прямоугольного параллелепипеда (см. рис. 4.19), 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.

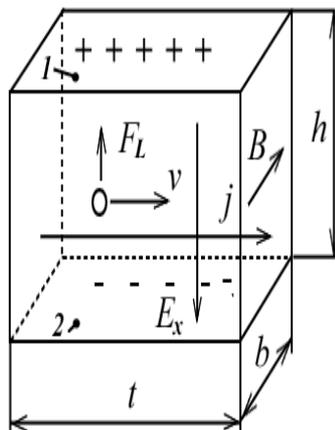


Рис. 4.19.

Появление поверхностных зарядов и холловской напряженности электрического поля в акцепторном полупроводнике

Рассмотрим сначала акцепторный полупроводник. С плотностью тока  $\vec{j}$  связана дрейфовая скорость движения  $\vec{v}_h$  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:

$$\vec{F}_L = e[\vec{v}_h \times \vec{B}] \quad (4.29)$$

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:  $\vec{F}_L = e\vec{E}_x = e[\vec{v}_h \times \vec{B}]$ . Заменяя в этом соотношении  $\vec{v}_h$  на  $\vec{j}$  из (4.28), получим более удобное для проведения экспериментов соотношение:

$$\vec{E}_x = \frac{[\vec{j} \times \vec{B}]}{en_h} = R[\vec{j} \times \vec{B}] \quad (4.30)$$

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.

Использование соотношения (4.30) позволяет сравнительно легко измерять такие важные характеристики полупроводника как концентрацию носителей заряда и их знак

Рассмотрим теперь эффект Холла в случае сопоставимых значений концентраций электронов и дырок в полупроводнике. Пусть в образце полупроводника в виде прямоугольного параллелепипеда (см. рис. 4.20) концентрации соответственно электронов и дырок равны  $N_e$  и  $N_h$ , а подвижности соответственно электронов и дырок равны  $\mu_e$  и  $\mu_h$ .

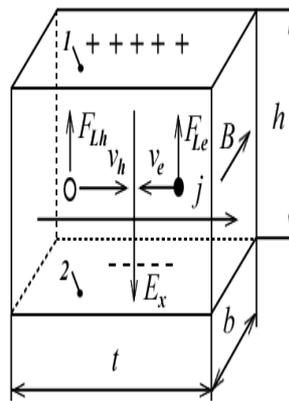


Рис. 4.20.

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  $\vec{E}_l$ , пусть направлен вдоль стороны  $l$  и задается согласно (4.28) выражением:

$$\vec{j} = (n_e \mu_e + n_h \mu_h) e \vec{E}_l \quad (4.31)$$

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:

$$n_h \mu_h F_L - n_h \mu_h E_x = n_e \mu_e F_L + n_e \mu_e E_x. \quad (4.32)$$

С учетом (4.27) и (4.28), получим соотношение для модулей векторов:

$$n_h \mu_h (E_l \mu_h) B e - n_h \mu_h E_x e = n_e \mu_e (E_l \mu_e) B e + n_e \mu_e E_x e. \quad (4.33)$$

Из этого соотношения можно найти отношение  $E_x / E_l$  как:

$$E_x / E_l = B (n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / (n_h \mu_h + n_e \mu_e). \quad (4.34)$$

Из него можно, используя (4.29) и (4.30), выразить значение  $R = E_x / j B$ :

$$R = (n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2) / \{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2 e\}. \quad (4.35)$$

Соотношения (4.34) и (4.35) упрощаются если полупроводник - беспримесный, у которого  $n_h = n_e$ :

$$E_x / E_l = B (\mu_h - \mu_e) \quad (4.36)$$

В частности, для беспримесного полупроводника по (4.36) можно найти разность подвижностей электронов и дырок.

#### Литература к теме 4.

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука, 1978, 790 с.
2. Толмачев В.В. Квантовая физика полупроводников. М.: Эликс. - 1997. - 83 с.
3. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. - М.: Мир. - 1966. - 568 с.
4. Каганов М.И. Электроны, фононы, магноны. - М.: Наука.- 1979. - 192 с.

#### Тема 5. Магнитные свойства твердых тел

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 (см. том 5). 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:

$$\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2) + \Psi_{r1}(\vec{r}_2) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_1), \quad \text{а} \quad \text{антисимметричной:}$$

$$\Psi_r(\vec{r}_1; \vec{r}_2) = \Psi_{r1}(\vec{r}_1) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_2) - \Psi_{r1}(\vec{r}_2) \cdot \Psi_{r2}(\vec{r}_1).$$

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  $U_{\text{обм}}$ . Можно показать [1-2], что  $U_{\text{обм}} = -2J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$ . Величина  $J$ , называемая *обменным интегралом* зависит от формы облаков электронов, и главным образом, от вида их перекрытия [1-2].

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.

При упорядочении магнитных моментов атомов получается значительный энергетический выигрыш, часто сравнимый с выигрышем в энергии химической связи при перегруппировках атомов. По этой причине упорядочение магнитных моментов атомов может вызывать перегруппировки атомов в сплаве и даже разделение однородного по составу сплава на две фазы, одну - сильно обогащенную элементом, отличающимся сильным упорядочением магнитных моментов, и другую - состоящую из "остальных" элементов. Подробно эти процессы рассмотрены в [3].

Магнитная анизотропия. В кристалле энергия магнитного упорядочения зависит от ориентации магнитных моментов атомов и связанных с ними электронных оболочек относительно кристаллографических осей. На рис. 5.1 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  $\vec{H}$  (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  $w_m$  обычно с помощью полуфеноменологических формул, приведенных в [4-5].

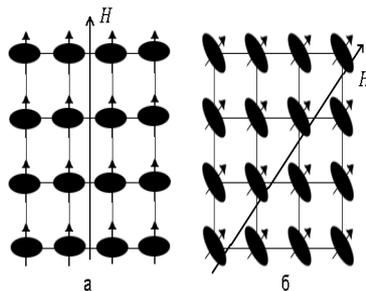


Рис. 5.1.

*Перекрытие электронных оболочек атомов в кристалле при различной ориентации магнитных моментов атомов и поля  $H$*

Например, для учета  $w_m$  в кристалле с кубической решеткой считают  $w_m$  функцией направляющих косинусов  $(\alpha, \beta, \gamma)$  вектора намагниченности относительно направлений типа [100] кристалла. Считают, что эта функция не должна зависеть от знака косинусов и должна быть симметричной относительно перестановок косинусов, поскольку в кубической решетке направления вдоль заданного вектора и ему противоположного эквивалентны, а также все три оси типа [100] эквивалентны. По этим соображениям функцию  $w_m$  записывают в виде:

$$w_m = K_1(\alpha^2 \beta^2 + \alpha^2 \gamma^2 + \beta^2 \gamma^2) + K_2 \alpha^2 \beta^2 \gamma^2 \quad (5.1)$$

Для любого кристалла существуют направления, для которых  $w_m$  имеет минимальные значения, их называют направлениями легкого намагничивания. Для железа с ОЦК решеткой, например, это - направления типа [100], для никеля с ГЦК решеткой - [111], для кобальта с гексагональной решеткой - направление вдоль гексагональной оси  $C$ . При создании новых магнитных материалов и их использовании в электротехнических изделиях необходим учет магнитной анизотропии, магнитная анизотропия обуславливает исключительно высокие характеристики многих материалов для постоянных магнитов (см. разд. 5.5).

**Магнитострикция.** При ориентации магнитных моментов атомов и связанных с ними электронных оболочек вдоль одного направления (см. рис. 5.1) 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 сократятся, 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 обратное магнитострикции, при котором деформация кристалла приводит к анизотропной ориентации электронных оболочек и связанных с ними магнитных моментов, а значит и появлению ненулевой намагниченности кристалла.

Выявлено много типов упорядоченного расположения магнитных моментов атомов, что связано со сложной зависимостью обменного интеграла от строения взаимодействующих атомов, расстояния между ними, а также от взаимного расположения ближайших соседей взаимодействующих атомов в трехмерной кристаллической решетке. Рассмотрим сначала случай атомов одного типа.

Величина обменного интеграла может быть положительной для ближайших соседей, что соответствует наиболее выгодной параллельной ориентации спинов и случаю *ферромагнетизма* (см. рис. 5.2 а), либо отрицательной, что соответствует наиболее выгодной антипараллельной ориентации спинов и случаю *антиферромагнетизма* (см. рис. 5.2 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. 5.2 (а, б) видно, что намагниченность ферромагнетика - значительная величина, а намагниченность антиферромагнетика близка к нулю.

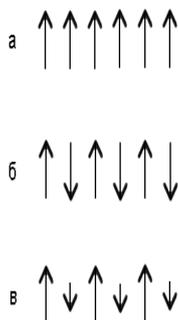


Рис. 5.2.

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. 5.2 в), что соответствует случаю *ферримагнетизма*. Намагниченность

ферромагнетика, часто называемого "феррит", - значительная величина, хотя и несколько меньшая, чем для типичных ферромагнетиков.

Методы исследования магнитного упорядочения. Самым информативным методом изучения ориентаций спинов в кристалле в настоящее время является рассеяние нейтронов. Как известно, нейтрон обладает магнитным моментом и поэтому способен взаимодействовать с магнитными моментами атомов. Также нейтрон способен рассеиваться на ядрах без изменения своей энергии. Поэтому дифракцию нейтронов используют для изучения ориентации спинов. Амплитуда рассеяния нейтронов каждого атома состоит из двух слагаемых: ядерного и магнитного. Первое - зависит от структуры ядра и отличается для различных изотопов. Второе - зависит от величины и ориентации магнитного момента атома  $\vec{\mu}$ , при взаимно перпендикулярной ориентации вектора рассеяния  $\vec{G}$  и  $\vec{\mu}$  оно - максимально, при параллельной ориентации  $\vec{G}$  и  $\vec{\mu}$  - оно равно нулю. Таким образом можно "отключать" магнитное рассеяние, намагнитив в направлении вектора рассеяния  $\vec{G}$  кристалл. При различных ориентировках вектора  $\vec{\mu}$  относительно  $\vec{G}$  можно получать серии дифракционных картин, из которых удастся выделить вклады от "магнитной" и "ядерной" систем.

В случае ферромагнитного упорядочения все атомы будут иметь одинаковую амплитуду рассеяния, и картина дифракции, как нейтронов, так и рентгеновских лучей будут идентичными.

В случае антиферромагнитного упорядочения магнитные моменты ближайших атомов будут иметь противоположную ориентацию, тогда магнитный вклад в амплитуду рассеяния будет иметь противоположные знаки, следовательно амплитуды рассеяния соседних атомов будут различными. Тогда должны появиться дополнительные "сверхструктурные магнитные" отражения, подобные тем, что наблюдаются при атомном упорядочении.

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.

Величина  $T_c$  зависит от прочности связи магнитных моментов друг с другом, в случае прочной связи  $T_c$  достигает 770 °С - для железа и превышает 1000 °С для железо-кобальтовых сплавов. Для многих веществ  $T_c$  невелика и составляет менее 300 К.

По величине  $T_c$  можно оценить энергию связи  $w$  магнитных моментов друг с другом. Для разрушения упорядоченного расположения магнитных моментов необходима энергия теплового движения порядка  $kT_c \approx w \approx 0,1$  эВ. Это - очень большая величина, намного превосходящая как энергию взаимодействия диполей, так и потенциальную энергию магнитного диполя в поле  $\vec{B}$ . В самом деле, энергия взаимодействия диполя находящегося в поле  $\vec{B}$  по порядку величины составляет  $w_d \approx |\mu||B| \approx 0,001$  эВ, что значительно меньше, чем  $kT_c$ . Следовательно, ее недостаточно для сохранения упорядоченного расположения магнитных моментов при температуре порядка  $T_c$ . Поэтому рассмотренное выше квантовое объяснение магнитного упорядочения, связанного с электростатическим взаимодействием электронных оболочек, является единственным удовлетворительным и общепризнанным. Тем не менее, часто используют классические модели, в основе которых лежит "чисто магнитная" природа магнитного упорядочения. Эти модели удачно предсказывают поведение магнетика вблизи  $T_c$ , хотя и основаны на не вполне корректных предположениях; рассмотрим наиболее удачные из них.

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  $\vec{B}_F$  пропорциональное намагниченности  $\vec{J}$  вещества:

$$\vec{B}_F = \mu_0 \lambda \vec{J}. \quad (5.2)$$

Здесь  $\mu_0$  - магнитная проницаемость вакуума.

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

$$\mu_0 \vec{J} = \chi_p (\vec{B}_0 + \vec{B}_F). \quad (5.3)$$

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

$$\chi_p = C / T \quad (5.4)$$

Подставив (5.2) и (5.4) в (5.3) и выразив из получившегося уравнения величину  $\chi = \mu_0 J / B_0$ , получим:

$$\chi = \mu_0 J / B_0 = C / (T - C\lambda) \quad (5.5)$$

Видно, что, если  $T \rightarrow C\lambda$ , то  $\chi \rightarrow \infty$ , что соответствует конечной намагниченности  $\vec{J}$  при внешнем поле  $B_0 = 0$ . Именно такая картина наблюдается в случае ферромагнетика при  $T < T_c$ . Отсюда заключают, что  $C\lambda = T_c$ ; зависимость  $\chi(T)$  тогда имеет вид:

$$\chi = C / (T - T_c) \quad (5.6)$$

Это - сравнительно хорошо подтвержденный экспериментально закон Кюри-Вейса.

На опыте наблюдаются незначительные отклонения от этого закона, в частности  $T_c$  в (5.6) оказывается на несколько градусов выше, чем  $T_c$ , определенная по факту исчезновения спонтанной намагниченности ферромагнетика. Это объясняют тем, что при  $T > T_c$

сохраняется некоторый ближний порядок в расположении магнитных моментов, на расстояниях порядка нескольких межатомных. Тогда парамагнитное состояние вещества вблизи  $T_c$  можно рассматривать как ферромагнитное с упорядоченным расположением магнитных моментов в очень малых областях и с большими значениями  $\chi$ .

Если использовать известное в теории парамагнетизма выражение для постоянной Кюри  $C$  (см. том 3, 5), то для  $\lambda$  получается выражение:

$$\lambda = T_c / C = 3k / (ng^2S(S+1)(\mu_B)^2) \quad (5.7)$$

Оценка величин  $\lambda$  и  $B_E = \lambda\mu_0 J$  для случая железа, для которого  $T_c \approx 1043$  К, фактор Ланде  $g \approx 2$ ;  $S \approx 1$ ;  $\mu_0 J \approx 2Tn$ , дает  $\lambda \approx 500$  и  $B_E \approx 1000$  Тл. Значение  $B_E$  оказывается очень большим, оно на несколько порядков превосходит наблюдаемые в кристаллах средние поля  $B_E$ , что показывает на нереалистичность объяснения магнитного упорядочения как результат чисто магнитного взаимодействия атомов. Тем не менее, такой подход в теории ферромагнетизма часто используется при вычислении температурной зависимости намагниченности.

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:

$$J = n\mu_s \cdot th(\mu_s B / kT) \quad (5.8)$$

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

$$J = n\mu_s \cdot th(\mu_s \mu_0 \lambda J / kT) \quad (5.9)$$

Это уравнение относительно  $J$  можно решить только численными методами или графически (см. рис. 5.5), обозначив  $1/t = \mu_s^2 \mu_0 \lambda n / kT$  и  $m = J / (n\mu_s)$ . Оно имеет ненулевое решение при  $T < T_c$ . Результаты решения представлены на рис. 5.6.

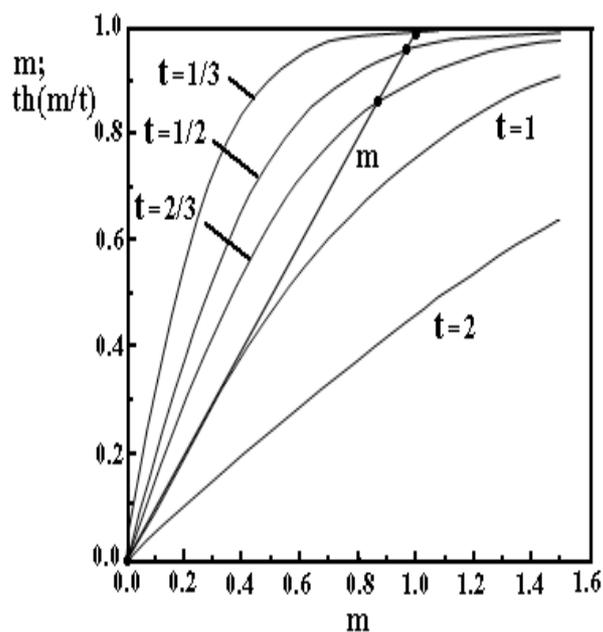


Рис. 5.5.

Графическое решение уравнения (5.9). Кривые 1 и 2 пересекаются в точке  $(0;0)$ , а при  $T < T_c$  и в темной точке сверху рисунка, соответствующей существованию ненулевой намагниченности при отсутствии внешнего поля  $B_0$ .

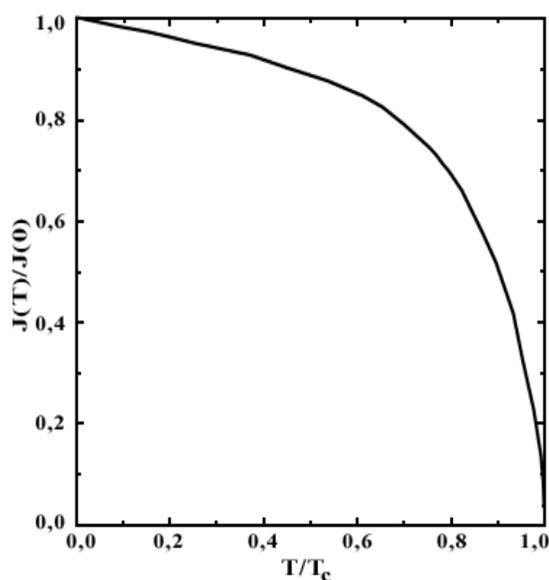


Рис. 5.6.

Зависимость  $J(T)$ , полученная как результат графического решения уравнения (5.9).

Можно показать, что при температуре  $T$  меньшей  $T_c$  и вблизи  $T_c$  зависимость  $J(T)$  имеет вид:

$$J(T) \approx J_0(1 - T / T_c)^{1/2} \quad (5.10)$$

Примерно такая (с показателем степени не  $1/2$ , а приблизительно  $0,33$ ) зависимость  $J(T)$  наблюдается экспериментально для большинства ферромагнетиков. Отсутствие резкого

скачка  $J(T)$  вблизи  $T_c$  дает основания отнести превращение ферромагнетика в парамагнетик при  $T_c$  к фазовому переходу второго рода.

Оценим ход зависимости  $J(T) = J_0 - \Delta J(T)$  вблизи абсолютного нуля. Для этого преобразуем (5.8), воспользовавшись асимптотической формулой  $th(a) \approx 1 - 2 \exp(-2a)$ .

$$\Delta J(T) \approx 2J_0 \exp(-2(\mu\mu_0 \lambda J / kT)) = 2J_0 \exp(-2T_c / T) \quad (5.11)$$

Эксперименты показывают другой характер изменения  $\Delta J(T)$  при  $T \rightarrow 0$ , а именно:

$$\Delta J(T) \approx J_0 C_{3/2} T^{3/2} \quad (5.12)$$

Постоянные  $J_0$  и  $C_{3/2}$  оказываются различными для разных ферромагнетиков.

Таким образом, теория среднего поля удовлетворительно описывает поведение намагниченности ферромагнетиков вблизи температуры Кюри, но дает крайне грубое описание  $\Delta J(T)$  при  $T \rightarrow 0$ . Теория спиновых волн, изложенная в [7], позволяет объяснить получаемую экспериментально степенную зависимость  $\Delta J(T)$ . Мы рассмотрим в следующем разделе лишь основные выводы этой весьма сложной теории для случая ферромагнетиков.

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:

$$U = -2J \sum_{p=1}^N \vec{S}_{p+1} \vec{S}_p \quad (5.13)$$

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 (см. рис. 5.7 б).

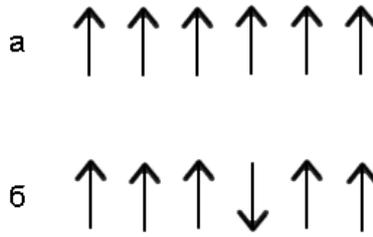


Рис. 5.7.

Ориентация спинов в линейной цепочке атомов: все спины сонаправлены (а), один спин в результате теплового движения приобрел противоположную ориентацию (б).

При этом две пары спинов будут противоположно направлены, и система спинов из-за этого приобретет дополнительную энергию:

$$\Delta U = 8JS^2 \quad (5.14)$$

Эта энергия - сравнительно велика (см. [разд. 5.4](#)), меньшей энергии соответствуют возбуждения системы спинов, схематически изображенные на рис. 5.8. 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 магнон уменьшает  $S_z$ -компоненту общего спина на единицу.

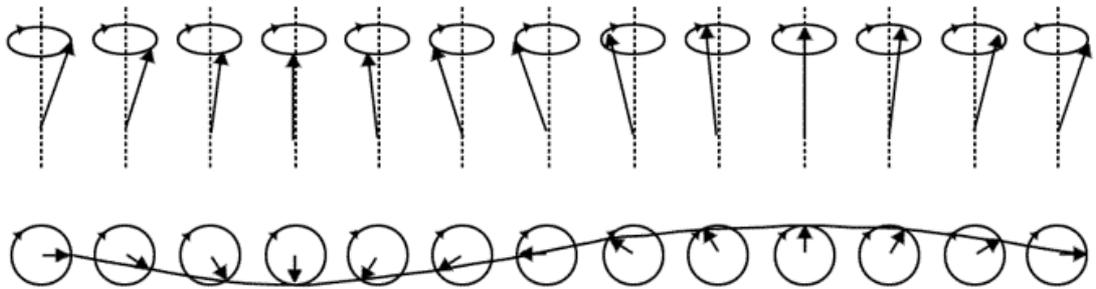


Рис. 5.8.

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

Можно вывести (см. [7]) закон дисперсии  $\omega(\vec{K})$  для магнонов, возбуждаемых в рассмотренной цепочке или в реальной структуре. Например, для линейной цепочки (см. рис. 5.7) получается закон дисперсии:

$$\hbar \omega = 4JS(1 - \cos(Ka)) \quad (5.15)$$

Для кубических решеток можно аналогичным образом получить закон дисперсии:

$$\hbar \omega = 2JS[z - \sum_{\delta} \cos(K\delta)] \quad (5.16)$$

Суммирование в (5.16) проводят по всем векторам, соединяющим выбранный узел решетки со всеми ближайшими соседями.

Общим для этих случаев является зависимость  $\omega(\vec{K})$  при малых  $\vec{K}$ .

$$\hbar\omega = 4JS(1 - \cos(Ka)) = 8JS \sin^2(Ka/2) \approx 2JS(Ka)^2 \quad (5.17)$$

Зависимость энергии (или частоты  $\omega(\vec{K})$ ) магнонов 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 магнонов  $E(\vec{K})$  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, как это делалось в главе 3 этой книги, с тем лишь отличием, что закон дисперсии для магнонов другой - он дается формулами (5.15-5.17), а не формулами (3.10), справедливыми для фононов. Также отметим, что магноны имеют одну поляризацию (а не три поляризации - как фононы или две - как фотоны в вакууме).

Примерно по той же схеме вычисляют  $J(T)$  и  $\Delta J(T)$  при низких температурах. При этом учитывают, что каждый магнон, согласно [7], уменьшает магнитный момент ферромагнетика на одну и ту же величину. В таком случае  $\Delta J(T)$  оказывается пропорциональной общему числу магнонов в единице объема ферромагнетика при заданной температуре, которая легко вычисляется с помощью распределения Бозе-Эйнштейна. Можно показать (см. задачу 5.3), что  $\Delta J(T) \approx J_0 C_{3/2} T^{3/2}$ . Здесь  $C_{3/2}$  - константа, зависящая от структуры ферромагнетика.

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. На рис. 5.10 приведена температурная зависимость различных вкладов в молярную теплоемкость никеля при различных температурах.

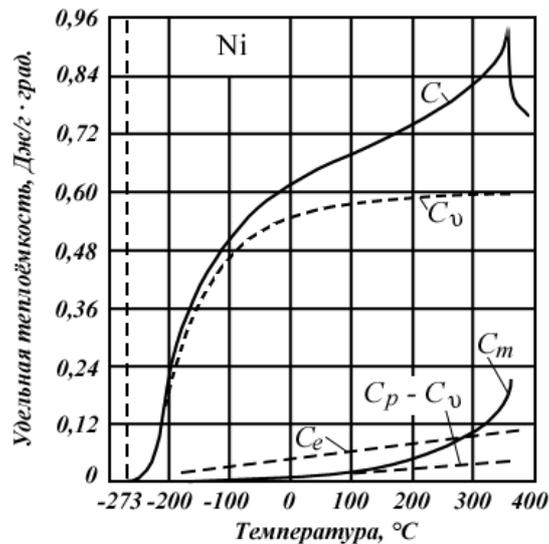


Рис. 5.10.

Температурная зависимость различных вкладов в молярную теплоемкость никеля при различных температурах  $T$

Видно, что 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 ферромагнетиков 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. Если бы кристалл представлял собой один домен, то вне кристалла получалось бы значительное магнитное поле (см. рис. 5.11 а). С этим полем связана плотность энергии магнитного поля, равная  $B^2 / 2\mu_0$  и значительная общая энергия магнитного поля. Эта энергия значительно уменьшится, если кристалл будет содержать два примерно одинаковых домена с противоположной ориентацией  $\vec{J}$ , (см. рис. 5.11 б). При наличии же четырех доменов (см. рис. 5.11 в) она станет еще меньше. Таким образом, с точки зрения уменьшения энергии

магнитного поля выгодно разбиение кристалла на домены так, чтобы силовые линии вектора  $\vec{B}$  как бы "замыкались" внутри кристалла.

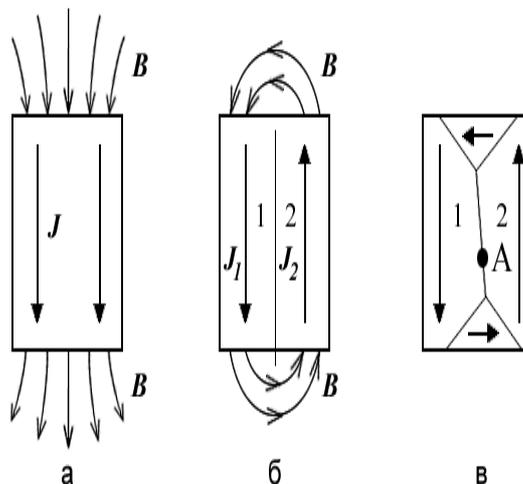


Рис. 5.11.

Схема разделения кристалла ферромагнетика на домены

Границы соседних доменов образуют *доменную стенку* толщиной порядка нескольких межатомных расстояний, в которой происходит переориентация магнитных моментов (см. рис. 5.12). 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, желательно менее чем в 1 межатомное расстояние, поскольку при увеличении ее толщины возрастает число магнитных моментов, ориентированных не в направлении легкого намагничивания. Однако при этом возрастает энергия обменного взаимодействия (см. [разд. 5.3](#)), для которой оптимальным будет постепенная смена ориентации магнитных моментов, как это изображено на рис. 5.12. Из условия минимума этих двух вкладов может быть вычислена оптимальная толщина доменной стенки [5-7].

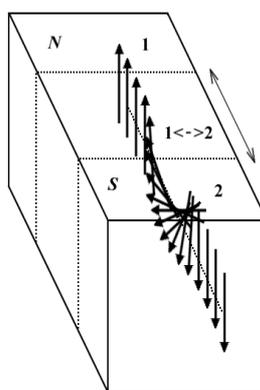


Рис. 5.12.

Схема распределения ориентаций магнитных моментов вблизи доменной стенки

Разбиение на слишком мелкие домены также не выгодно, поскольку при этом будет возрастать "поверхностная" энергия доменных стенок. Из-за рассмотренной конкуренции поверхностной энергии и энергии макроскопического магнитного поля и наблюдаются "оптимальные" размеры доменов порядка 1 мкм. К приблизительно таким размерам приводят и теоретические расчеты, приводимые в книгах по магнетизму [5-6].

Существованием доменов объясняется перемагничивание многих ферромагнетиков в очень малых магнитных полях. Рассмотрим участок ферромагнетика, намагничиваемый полем напряженности  $\vec{H}$ , состоящий из нескольких доменов с разной ориентацией  $\vec{J}$  (см. рис. 5.11). Для простоты будем считать, что доменная стенка имеет малую толщину, порядка межатомного расстояния. Домен 1 пусть имеет выгодную ориентацию  $\vec{J}$  параллельную  $\vec{H}$ , домен 2 - невыгодную. Ему было бы выгодно иметь ориентацию  $\vec{J}$  как у домена 1, однако дружный поворот всех магнитных моментов атомов сразу энергетически затруднен и статистически маловероятен в малых полях  $\vec{H}$ . Каждому отдельному атому домена 2 повернуться вдоль  $\vec{H}$  не дают его соседи-атомы, удерживающие его от такого разворота. Однако атом А, находящийся в домене 2 у границы раздела доменов 1 и 2 находится в особом положении - у него примерно равное число ближайших соседей как с выгодной, так и с невыгодной ориентацией. Поэтому магнитный момент этого атома может сравнительно легко изменить свою ориентацию с невыгодной на выгодную и атом присоединится к домену 1. При этом домен 1 увеличится, а домен 2 уменьшится. Получится тогда, что участок доменной стенки как бы переместился на одно межатомное расстояние. Если учесть конечность толщины доменной стенки, то ход рассуждений сохраняется: получается последовательная переориентация магнитных моментов атомов и эффект перемещения доменной стенки. Такой механизм *перемагничивания*, называемый перемагничиванием за счет *смещения доменных стенок*, наблюдается в малых магнитных полях.

Движение доменных стенок у различным образом ориентированных доменов происходит в полях разной величины. Различные дефекты структуры (см. гл. 2) также препятствуют движению доменных стенок, причем в разной степени. Поэтому различные области ферромагнетика перемагничиваются в разных полях  $\vec{H}$  и обеспечивают разные приращения вектора  $\vec{J}$  ферромагнетика в целом. Из-за этого зависимость  $J(|\vec{H}|)$ , называемой *кривой намагничивания*, имеет сложный вид, изображенный на рис. 5.13.

Относительная магнитная восприимчивость  $\chi = J / H$  и относительная магнитная проницаемость  $\mu = B / (\mu_0 H)$  также сложным образом зависят от  $H$  (см. рис. 5.14).

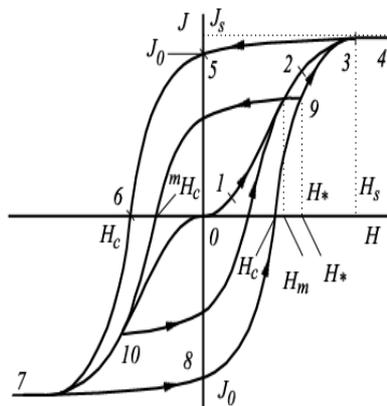


Рис. 5.13.

Кривая намагничивания и петли гистерезиса (полная и частные) ферромагнетика

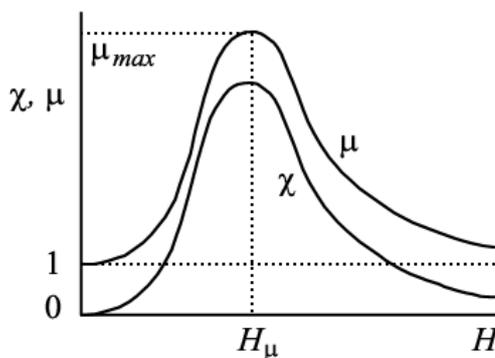


Рис. 5.14.

Зависимости относительной магнитной восприимчивости  $\chi = J / H$  и относительной проницаемости  $\mu = B / (\mu_0 H)$  от  $H$

Кривая намагничивания имеет 4 характерных участка. Участок 0-1 называется областью обратимого движения доменных стенок, закрепившихся местами за дефекты. При таком движении возрастает площадь и энергия доменных стенок; при уменьшении вектора  $\vec{H}$  стенки, стремясь уменьшить свою поверхностную энергию, возвращаются в первоначальное положение подобно упругим растянутым мембранам. Участок 1-2 соответствует необратимому движению доменных стенок. При таком движении стенки преодолевают препятствия, мешающие их движению, и уменьшение поля  $H$  уже не приведет к их перемещению на старые места, поскольку им тогда снова придется преодолевать "пройденные" препятствия, но в противоположном направлении. Участок 2-3 соответствует механизму перемагничивания за счет вращения векторов  $\vec{J}$  не совсем удачно ориентированных доменов как целых, такое вращение наблюдается в сравнительно сильных полях  $H$  и называется механизмом перемагничивания за счет вращения вектора

намагниченности. Участок 3-4 соответствует полному развороту всех магнитных моментов ферромагнетика вдоль вектора  $H$ , отвечающая ему величина  $|\vec{J}|$  называется намагниченностью насыщения  $|\vec{J}| = J_s$ , а модуль поля  $H$ , в котором достигается  $|\vec{J}| = J_s$ , называется *полем насыщения*  $H_s$ . Величина  $J_s$  показывает максимально достижимую величину магнитного момента единицы объема ферромагнетика.

Если теперь начать уменьшать  $H$  от  $H_s$  до нуля, то отвечающая насыщению картина расположения магнитных моментов в первом приближении сохранится: в самом деле, теперь магнитные моменты атомов в доменах могут сохранить свою ориентацию благодаря взаимодействию друг с другом. Поэтому при  $H = 0$   $|\vec{J}|$  будет иметь конечную величину, называемую *остаточной намагниченностью*  $J_r$ . При изменении  $H$  от  $H_s$  до 0 точка, задающая состояние магнетика, окажется в точке 5 на рис. 5.13.

При увеличении  $H$ , в сторону против  $J_r$  начнется процесс перемангничивания, уже рассмотренный выше, и при значении  $H = H_c$ , называемом *полем размагничивания*, или значительно чаще *коэрцитивной силой*,  $\vec{J}$  примет нулевое значение (точка 6 на рис. 5.13). При этом образец ферромагнетика размагнитится: более точно, в его объеме будут домены с разной ориентацией вектора  $\vec{J}$ , но векторная сумма всех магнитных моментов ферромагнетика станет равной нулю. При дальнейшем увеличении  $H$  образец опять намагнитится, но уже в противоположную сторону. При  $H = -H_s$  будет достигнуто насыщение  $|\vec{J}| = J_s$  (точка 7 на рис. 5.13).

Если  $H$  снова изменить от  $-H_s$  до  $H_s$ , то получится участок 7-8-4 зависимости  $J(H)$ . В итоге получается зависимость напоминающая петлю, называемой *петлей гистерезиса*.

Можно, двигаясь по участку 8-4, не дойти до точки 4 и в точке 9, которому отвечает поле  $H_m$ , начать снова уменьшать поле  $H$  от  $H_m$  до  $-H_m$ ; тогда точка 9, задающая состояние магнетика, перейдет в точку 10. Определенным образом изменяя  $H$ , можно оказаться в принципе в любой точке внутри петли гистерезиса. При циклическом изменении

$H$  от  $H_m$  до  $-H_m$  получается так называемая *частная петля гистерезиса* с максимальным полем  $H_m$ . Можно показать, что концы частных петель гистерезиса располагаются на кривой намагничивания. В различных устройствах часто используются частные циклы перемагничивания с  $H_m = H_{\mu}$  - так называемым полем максимальной проницаемости  $\mu$ , поскольку в случае, когда  $\mu$  - максимально, наиболее эффективным образом используется свойство ферромагнетика усиливать поле  $B$ .

Можно показать, что площадь петли гистерезиса, построенной в координатах  $H - B$  равна энергии затрачиваемой на циклическое перемагничивание единицы объема ферромагнетика.

Таким образом, чтобы определить значение  $\vec{J}$  ферромагнетика недостаточно знать поле  $\vec{H}$ , в котором он находится, необходимо знать "предисторию" ферромагнетика. В частности, намагниченность магнетика после "отключения" поля  $\vec{H}$  будет зависеть от величины этого поля. Этот эффект используется для магнитной записи информации. Для этого различные участки ферромагнетика в виде тонкого магнитного слоя, нанесенного на диамагнитный диск или ленту, намагничивают полем  $\vec{H}$ , создаваемым миниатюрным источником магнитного поля - записывающей головкой. В результате такой записи различные участки ферромагнетика будут иметь различную остаточную намагниченность, несущую в себе информацию о поле  $\vec{H}$ , создаваемом записывающей головкой. Записанная информация может долго храниться. С помощью различных устройств называемых считывающими головками, принципы работы которых обсуждаются в [9], величина  $\vec{J}$  в разных точках ленты или диска может быть измерена, а записанная информация - считана и превращена в записанный ранее электрический сигнал. В настоящее время достигнута очень высокая плотность записи - свыше 100 мегабит на  $\text{см}^2$ , то есть площадь единицы записи имеет порядок 1  $\text{мкм}^2$ . Очевидно, что необходимыми требованиями к "носителю" магнитной записи являются: достаточно высокие коэрцитивная сила и температура Кюри, а также максимально близкая к линейной зависимость  $J_r(H_m)$  [9].

Магнитные материалы. Для различных технических приложений необходимы материалы с различными параметрами петли гистерезиса и, в первую очередь, коэрцитивной силы - от  $10^{-1}$  до  $10^6$  А/м. Наибольшее практическое применение имеют материалы с особо

малыми (*магнитномягкие магнитные материалы*) и особо большими (*магнитножесткие магнитные материалы*) значениями  $H_c$ .

Магнитномягкие материалы применяют в устройствах, которые должны перемагничиваться в малых магнитных полях, это: датчики магнитного поля, считывающие головки для чтения магнитной записи, сердечники трансформаторов. В большинстве этих случаев желательно иметь материал с максимальными значениями  $M$ ; минимальными значениями  $H_c$  и площади петли гистерезиса. Для таких материалов необходимо максимально облегчить движение доменных стенок при перемагничивании, уменьшить влияние магнитной анизотропии и магнитострикции. Для этого в сплаве необходимо уменьшить количество дефектов, мешающих свободному движению доменных стенок, и использовать составы сплавов со слабой магнитной анизотропией и магнитострикцией. В случае использования магнитномягких материалов в переменных магнитных полях желательно иметь большое электросопротивление магнетика. Именно таким требованиям удовлетворяют современные магнитномягкие материалы.

Магнитножесткие (магнитнотвердые) материалы должны обладать помимо больших значений  $H_c$  также значительными величинами: 1)  $B_r$ , определяющем поток вектора  $B$  данного магнита, и 2) максимального произведения  $(BH)_m$  (измеренного во втором квадранте ( $H < 0$ ;  $B > 0$ , см. рис. 5.13)). Последняя величина приближенно определяет максимальный вращательный момент магнита единичного объема, находящегося в поле  $H$ . Желательно также иметь высокую временную и температурную стабильность перечисленных параметров и удовлетворительные прочность и пластичность.

Получить максимальные значения  $H_c$  удается при выполнении нескольких обязательных условий. Во-первых, обеспечивают невозможность перемагничивания за счет движения доменных стенок, для чего создают структуру, в которой мелкие однодоменные частицы ферромагнитного вещества окружены прослойками парамагнитного вещества. В таком случае перемагничивание может быть осуществлено только за счет вращения вектора  $\vec{J}$  домена, что осуществимо только в сравнительно больших полях  $H$ . Такая структура, состоящая из однодоменных частиц, получается как правило 1) при мелком размоле ферромагнетика, с последующими смешиванием его с парамагнитным связующим веществом и спеканием, или же 2) при использовании разделения однородного твердого раствора на две фазы ( парамагнитную и ферромагнитную (см. [разд. 2.3](#)). Во-вторых, для

затруднения вращения вектора  $\vec{J}$  домена используют вещества с очень сильной магнитной анизотропией или обеспечивают вытянутую форму доменов.

Все параметры ( $H_c$ ,  $B_r$ ,  $(BH)_{\text{ж}}$ ) увеличиваются при одинаковой ориентации осей легкого намагничивания (или в ряде случаев длинных осей доменов) вдоль одного направления. Последнюю достигают, ориентируя частицы размолотого порошка в сильном магнитном поле (порядка 1 Тл), или же проводя начальные стадии разделения твердого раствора на фазы во внешнем магнитном поле (порядка 0,1 Тл). По этой же причине использование монокристаллических магнитов со сформированной в нем двухфазной структурой также позволяет улучшить все параметры магнита по сравнению с поликристаллическими материалами.

### **Литература к теме 5.**

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Том. 3. Квантовая механика. - М.: Наука.- 1963. - 832 с.
2. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Физматгиз. 1962. 768 с.
3. Физические величины. Справочник п.ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат. 1991. 1232 с.
4. Бозорт Р. Ферромагнетизм. - М.: Изд-во иностранной литературы.- 1956. - 784 с.
5. Вонсовский С.В. Магнетизм. - М.: Наука.- 1971. - 1032 с.
6. Изюмов Ю.А., Найш В.Е. Озеров Р.П. Нейтронография магнетиков. М.: Атомиздат, 1981. 312 с.
7. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. - М.: Наука, 1978, 790 с.
8. Каганов М.И. Электроны, фононы, магноны. - М.: Наука.- 1979. - 192 с.
9. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. - М.: Мир. - 1966. - 568 с.

### **Тема 6. Оптические явления**

Перераспределение электронов по энергетическим уровням в полупроводниках может происходить не только вследствие теплового движения, но и под действием электромагнитного излучения. Оптические эффекты в полупроводниках используют 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, если

$$\omega > E_g / h \quad (1)$$

Соответственно максимальная длина волны определяется соотношением

$$\lambda_{\max} = hc / E_g \quad (2)$$

Если на поверхность полупроводника падает свет с частотой, удовлетворяющей соотношению (1), 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  $D_{\text{эфф}}$ . В общем случае:

$$D_{\text{эфф}} = (n + p) / (n/D_p + p/D_n) \quad (3)$$

Для собственного полупроводника ( $n = p$ ):  $D_{\text{эфф}} = 2D_n D_p / (D_n + D_p)$ , 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,  $D_{\text{эфф}} = D_p$  при  $n \gg p$  и  $D_{\text{эфф}} = D_n$  при  $p \gg n$ .

Соотношение (2) выражает лишь необходимое условие возникновения фотопроводимости. 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*. Впервые он был предсказан Я.И. Френкелем и наблюдался Е.Ф. Гроссом в кристалле закиси меди. Экситон сходен с атомом водорода. Уровни энергии экситона располагаются у дна зоны проводимости. Так как экситоны являются электрически

нейтральными системами, то их возникновение в полупроводнике не приводит к появлению дополнительных носителей заряда, вследствие чего поглощение света не сопровождается увеличением проводимости полупроводника. При столкновении с фононами, примесными атомами и другими дефектами решетки экситоны или рекомбинируют, или «разрываются». В первом случае возбужденный электрон переходит в валентную зону, а энергия возбуждения передается решетке или излучается в виде квантов света (люминесценция). Во втором случае образуется пара носителей - электрон и дырка, которые обуславливают повышение электропроводности полупроводника. Поэтому спектр экситонного поглощения наблюдается при очень низких температурах.

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  $E_{\text{прим}} \ll E_g$ , 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 :

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

(4)

Величина фотопроводимости  $G$  определяется как:

$$G = J_{\phi} / V_0 \quad (5)$$

где  $V_0$  - разность потенциалов на полупроводнике.

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

$$\gamma_0 = G/\Phi = J_{\Phi} / (V_0 \Phi). \quad (6)$$

Поскольку количество образующихся носителей пропорционально световому потоку  $\Phi$ , фотосопротивления применяют в фотометрии. Наиболее чувствительные фотосопротивления изготавливаются из сернистого кадмия (CdS), у которого фотопроводимость в  $10^5 - 10^6$  раз превышает темновую проводимость в видимой области. Фотосопротивления из полупроводников PbS, PbSe, PbTe, InSb используются в качестве детекторов инфракрасного (ИК) излучения.

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,  $\tau$ , принято различать флюоресценцию ( $\tau < 10^{-6}$  с) и фосфоресценцию ( $\tau > 10^{-5}$  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.

Кристаллическими люминофорами (кристал-лофосфорами) могут быть диэлектрики и полупроводники (металлы люминесцировать не могут). Уровни активатора (А) располагаются между зонами С и V. Для возникновения длительного свечения люминофор должен содержать также мелкие локальные уровни другой примеси, называемые ловушками (Л). В невозбужденном состоянии все уровни активатора заполнены электронами, все уровни ловушек свободны.

Под действием света с частотой  $\omega$  или других факторов атомы активатора возбуждаются: электроны с уровня А могут перейти в зону проводимости и странствуют по кристаллу до тех пор, пока либо встретится с ионом активатора и рекомбинируют с ним, либо будут захвачены ловушкой. Рекомбинация, т.е. возвращение на уровень А, сопровождается испусканием фотона люминесценции с частотой  $\omega$ . Захват ловушкой не

сопровождается свечением. Выделяемая при этом энергия расходуется на возбуждение колебаний решетки, т.е. на образование фононов. Захваченный ловушкой электрон теряет подвижность и не может рекомбинировать с ионом А. Однако через некоторое время под действием тепловых колебаний решетки электрон может освободиться из ловушки и снова перейти в зону С, после чего вновь будет захвачен ловушкой, либо встретится с активатором и рекомбинирует с ним. При наличии ловушек период послесвечения может составлять от 1 мкс до нескольких часов.

Обычно при фотолюминесценции послесвечение имеет меньшую частоту, чем возбуждающее излучение, поскольку часть энергии поглощенного кванта передается кристаллу. Другими словами: свет люминесценции сдвинут по отношению к возбуждающему свету в красную сторону. Этот вывод носит название *правила Стокса*.

Энергетический выход или КПД люминесценции  $\eta$  - это отношение излученной энергии к поглощенной энергии. Вавиловым было установлено, что  $\eta$  растет пропорционально длине волны  $X$  возбуждающего света, точнее  $\eta \propto X^{-1}$  - закон Вавилова.

Кристаллофосфоры применяются в электронно-лучевых (в частности, телевизионных) трубках, в люминесцентных лампах (лампах дневного света), для изготовления светящихся экранов в рентгеновских установках, в сцинтилляционных счетчиках заряженных частиц и для других целей.

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

Фототок пропорционален числу носителей, генерируемых светом в единицу времени, а значит и величине светового потока:

$$J_{\phi} = g \Phi_0, \quad (7)$$

Где

$g = \eta(1 - r)/h\nu$  - удельная чувствительность. Здесь  $\eta$  - квантовый выход внутреннего фотоэффекта,  $r$  - коэффициент отражения.

Если цепь р-п - перехода разомкнута, на его границах будут накапливаться объемные заряды, поле которых направлено противоположно контактной разности потенциалов. Вследствие этого на переходе возникает фото - ЭДС  $U_{\phi}$ , которая будет увеличиваться до

значения  $U_{\Phi 0}$ , при котором прямой ток уравновесит фототок. В результате полный ток  $J$  через переход будет равен нулю:

$$J = J_0 - J_n - J_{\Phi} = 0, \quad (8)$$

Следовательно,

$$J_n e^{eV/kT} - J_n - J_{\Phi} = 0 \quad (9)$$

Откуда

$$V_{\Phi 0} = kT/e \ln(J_{\Phi}/J_n + 1) = kT/e \ln(g\Phi_0/J_n + 1) \quad (10)$$

При включении фотоэлемента в цепь с нагрузочным сопротивлением  $R_n$  только часть неосновных носителей, возбужденных светом, идет на понижение потенциального барьера. Другая часть создает ток  $-J$ , протекающий по замкнутой цепи:

$$-J = J_n (e^{eV/kT} - 1) - J_{\Phi}, \quad (11)$$

Откуда

$$V_{\Phi} = kT/e \ln[(J_{\Phi} - J)/J_n + 1] \quad (12)$$

Работа освещаемого р-п - перехода при отсутствии внешнего источника называется вентильным режимом работы фотоэлемента. Этот режим используется для прямого преобразования световой энергии в электрическую, например, в солнечных батареях. КПД таких преобразователей достигает 17%, напряжение — десятков вольт, а мощность десятков киловатт (кВт). Она зависит от нагрузочного сопротивления  $R_n$  и при некотором его значении достигает максимального значения. Отношение этой мощности к мощности падающего излучения представляет собой КПД преобразователя. Основными полупроводниковыми элементами, применяемыми промышленностью для изготовления солнечных батарей, являются в настоящее время кремний (Si) и арсенид галлия (GaAs).

В обычных фотоэлементах поглощение света и генерация электронно-дырочных пар происходит на освещенной поверхности полупроводника, а не непосредственно в области перехода, из-за чего возникают значительные потери, обусловленные поверхностной рекомбинацией и сопротивлением поверхностного слоя. Для улучшения эффективности прибора необходимо уменьшить толщину диффузионного (приповерхностного) слоя, что приводит к уменьшению выходной мощности, которую можно получить с фотоэлемента. Поэтому в последнее время все большее значение приобретают гетеропереходные фотоэлементы, свободные от указанных недостатков.

Если свет падает на гетеропереход со стороны полупроводника с более широкой запрещенной зоной,  $E_{g2} > E_{g1}$ , то фотоны с частотой  $\nu$ , удовлетворяющей неравенству  $E_{g1}/h < \nu < E_{g2}/h$ , свободно проходят через широкозонный материал и поглощаются в узкозонном материале в непосредственной близости от перехода. Этот эффект, известный как эффект окна в гетеропереходах, дает возможность существенно повысить эффективность и быстродействие фотоэлементов.

Режим, при котором к фотоэлементу прикладывается внешнее напряжение  $V_0$  обратном направлении, называется фотодиодным. Ток в цепи в этом случае определяется формулой (10) при замене  $U_{ф}$  на  $IR_n - V_0 < 0$ , где  $V_0$  выбирается таким образом, чтобы экспонента в этой формуле была значительно меньше единицы, что легко достигается при обычных температурах. Фотодиод имеет линейную световую характеристику и используется при создании чувствительных датчиков для измерения интенсивности световых потоков.

При пропускании через фотоэлемент прямого тока концентрация неосновных носителей у границ р-п - перехода резко повышается и становится значительно выше равновесной. Повышается и концентрация основных носителей. Диффундируя вглубь полупроводника, неравновесные носители рекомбинируют. Рекомбинация - это процесс, при котором электрон из зоны проводимости, теряя энергию переходит в валентную зону, где соединяется с дыркой (процесс, обратный процессу образования пары электрон - дырка). Если при этом существенная доля актов рекомбинации происходит с излучением света (излучательная рекомбинация), то, создав условия для выхода этого света наружу, полупроводниковый диод можно использовать как источник излучения. Такой прибор называется *светодиодом*.

Эффективность светодиода определяется его внутренним квантовым выходом  $\eta_{\text{вн}}$ , представляющим собой отношение числа испускаемых при рекомбинации квантов к числу инжектированных неосновных носителей:

$$\eta_{\text{вн}} = \frac{P_{\text{изл}}}{(P_{\text{изл}} + P_{\text{безызл}})} \quad (13)$$

где  $P_{\text{изл}}$  и  $P_{\text{безызл}}$  - вероятности излучательной и безызлучательной рекомбинации в единицу времени. Если бы рекомбинация была только излучательной, то  $\eta_{\text{вн}} = 1$ . Однако наряду с излучательной рекомбинацией всегда протекает процесс безызлучательной рекомбинации, которую можно уменьшить только очистив полупроводник от глубоких рекомбинационных центров.

Серьезной технической проблемой является вывод излучения наружу, поскольку из-за высокого показателя преломления полупроводников у них мал угол полного внутреннего отражения, и только незначительная часть излучения выходит наружу. Поэтому мощность

излучения светодиода в непрерывном режиме невелика - порядка нескольких милливатт. Повышение эффективности работы светодиодов и фотопреобразователей в различных спектральных диапазонах достигается с использованием гетероструктур. Существенные преимущества гетеропереходов как основы фотоэлектронных приборов вытекают из возможности использования широкозонной части гетероперехода в качестве «окна», прозрачного для света, поглощаемого в узкозонной части, что обеспечивает выход рекомбинационного излучения без самопоглощения в материале полупроводника.

Светодиоды используются в качестве источников излучения в оптиковолоконных линиях связи, для направленной оптической связи в пределах прямой видимости, а также в качестве малогабаритных световых индикаторов. Выбирая для светодиода полупроводники с различной шириной запрещенной зоны, можно получать различные цвета свечения диода.

Важным свойством гетеропереходов является возможность преобразования инфракрасного (ИК) излучения в видимый свет. Такие преобразователи используются в приборах «ночного видения», которые получают все большее распространение в различных областях техники. Техническое решение этой проблемы ранее осуществлялось на основе так называемых электронно-оптических преобразователей, основанных на внешнем фотоэффекте, в которых электроны, эмиттируемые с чувствительного к инфракрасному излучению катода, ускоряются внешним полем и бомбардируют люминесцентный экран. Большие габариты, малая ударная и вибростойкость, необходимость высокого вакуума и высоких напряжений - это далеко не полный перечень недостатков таких приборов.

Использование структур с резкими гетеропереходами или же кристаллов с переменной шириной запрещенной зоны - плавных гетеропереходов - открыло возможность создания твердотельных преобразователей ИК излучения в видимое.

При использовании в качестве широкозонных слоев  $Al_xGa_{1-x}As$ , а узкозонной -  $SiGaAs$  длинноволновая граница преобразования составляет 1,65 мкм. Огромную ценность таким приборам придает наличие значительных коэффициентов усиления ( $10^2$  -  $10^3$ ) при преобразовании. Легирование полуизолирующего слоя GaAs другими примесями (например, железом) позволяет продвинуться значительно дальше в ИК область, вплоть до 3,5 - 4,0 мкм.

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  $\nu$ . 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 растет и интенсивность света, выходящего наружу.

В полупроводниковых лазерах индуцированное излучение возникает при излучательной рекомбинации электронно-дырочных пар. Наиболее широкое применение получили инжекционные лазеры на арсениде галлия (GaAs), а также InAs, InP, в которых инверсная заселенность достигается инъекцией неосновных носителей через p-n - переход между двумя вырожденными областями полупроводника.

Рассмотрим вначале лазер на гомопереходах, т.е. случай, когда ширины запрещенных зон в контактирующих полупроводниках одинаковы. Для достижения инверсной заселенности необходимо, чтобы разность энергиями Ферми была больше энергии кванта генерируемого излучения. Поэтому в лазере на основе обычного p-n -перехода необходимо использовать «вырожденный» переход, когда степень легирования p- и n-частей перехода настолько велика, что уровень Ферми находится в разрешенных зонах.

Если к такому p-n- переходу приложить прямое смещение  $V$ , резко снижающее потенциальный барьер, то в нем появится область A с инверсным заселением зон: над практически свободными уровнями валентной зоны будут находиться полностью заполненные уровни зоны проводимости. В этих условиях спонтанно возникшие кванты вследствие рекомбинации электронно-дырочных пар вызывают стимулированное излучение.

Для возникновения генерации необходимо создание такой инверсной заселенности, при которой усиление света в активной области перекрывало бы все его потери, связанные с прохождением через диод и малым отражением от его зеркальных граней. Ток  $J_{\text{пор}}$ , при котором выполняется это условие, называется пороговым. При  $J < J_{\text{пор}}$  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.

Применение структур с гетеропереходами качественно меняет положение. Основная идея состоит в том, что благодаря гетеропереходным барьерам инжектированные носители удерживаются в активной области, так что инверсная заселенность достигается легче и усиление лазера больше. Осуществление таких лазеров оказалось особенно эффективным при использовании двойных гетероструктур (ДГС). Благодаря потенциальным барьерам на границах гетеропереходов отсутствуют рекомбинационные потери в пассивных областях (эмиттерах), а вследствие заметной разницы в диэлектрических постоянных средний слой играет роль высококачественного волновода, и потери светового излучения в пассивных областях пренебрежимо малы. В результате удается значительно снизить пороговую плотность тока до  $500 \text{ А/см}^2$  при полном КПД, равном 25%, и обеспечить осуществление непрерывного режима работы лазера при комнатной температуре, что было невозможно при использовании инжекционных лазеров на обычных р-п – переходах. Кроме того, при  $J > J_{\text{пор}}$  вследствие роста вероятности вынужденных оптических переходов увеличивается отношение вероятностей излучательной рекомбинации к безызлучательной. Спектральный состав генерируемого излучения определяется шириной запрещенной зоны узкозонного полупроводника.

### 3. ГРАФИК САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТА

1. Обзор литературы по теме доклада (16 час.):
  - Радиационные дефекты.
  - Пластические свойства кристаллических тел. Хрупкое разрушение.
  - Зоны Бриллюэна.
  - Эффект Холла.
  - Ионная, электронная и дипольная тепловые поляризации.
  - Сегнетоэлектрики.
  - Ферромагнетизм и антиферромагнетизм.
  - Опыт Дорфмана.
  - Парамагнетизм и диамагнетизм твердых тел.
  - Магнитный резонанс.
  - Сверхпроводимость.
  - Высоко температурная проводимость.
  - Эффекты Джозефсона.
  - Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов. Теория Гинзбурга – Ландау.
  - Притяжение между электронами. Куперовские пары.
  - Теория Бардина – Купера - Шриффера.
2. Выполнение домашних заданий к каждому практическому занятию (3-5 задач) (6 час.).
3. Самостоятельное изучение следующих тем (10 час.):
  - Теория симметрии кристаллов,
  - Расчет концентрации точечных дефектов с учетом частоты колебаний атомов,
  - Напряжения необходимые для образования дислокаций в совершенном кристалле,
  - Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Источники дислокаций,
  - Колебания атомов одномерной решетки с базисом,
  - Теплоемкость решетки с базисом,
  - Механизмы рассеяния фононов на фононах,
  - Спонтанное и индуцированное излучение. Твердотельные лазеры.
4. Подготовка к контрольной работе (4 час.).
5. Подготовка к экзамену.

#### 4. ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

На практических занятиях предлагается решение задач по следующим темам:

- 1) Химические связи и энергия связи кристаллов – 2 часа
- 2) Дефекты в кристаллах. Механические свойства твердых тел.- 2 часа
- 3) Колебания атомов кристаллической решетки. Тепловые свойства твердых тел. -2 часа.
- 4) Электронная теория металлов (2 ч.)
- 5) Энергетическая зонная структура. (2 ч.)
- 6) Диэлектрики. (2 ч.)
- 7) Свойства однородных полупроводников.
- 8) Диамагнетизм и парамагнетизм. Ферромагнетизм, антиферромагнетизм. (2 ч.)
- 9) Контрольная работа. (2 ч.)

По мимо решения задач на практических занятиях заслушиваются доклады студентов (темы докладов представлены в разделе самостоятельной работы).

Перед решением задач по каждой теме практического занятия необходимо повторить соответствующий теоретический раздел. По каждой теме кроме задач, решаемых на занятии, необходимо выполнение домашних задач. Домашние задачи оформляются на листах формате А4 и сдаются преподавателю перед началом следующей темы. После окончания семестра проводится контрольная работа (решение задач) на закрепление знаний по пройденной теме практического занятия.

##### Рекомендуемая литература:

- 7.Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 2000.
- 8.Ландау Л.Д. Теоретическая физика: В 10 т: учеб. пособие. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2: Теория конденсированного состояния/ под. Ред Л.П. Питаевского. 2004.
- 9.Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Гос. изд-во тех.-теор.лит., 1989.
- 10.Дж.Блейкмор. Физика твердого тела. М.: Мир, 1988. 608 с.
- 11.Г.Дж.Голдсמיד Задачи по физике твердого тела. М.: Наука, 1982.
- 12.И.Е. Иродов Атомная и ядерная физика. Сборник задач. С.-П.: изд-во «Лань», 2002.

#### 4.1 ОБЩИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ

1. Решение задач всех разделов удобно начинать с краткой записи условия, где необходимо отразить не только данные числовые значения, но и все дополнительные условия, которые следуют из текста задачи: неизменность или кратность каких-либо параметров, их граничные значения, условия, которые определяются физическим содержанием задачи.

2. Необходимо обдумать физическое содержание задачи, выяснить, к какому разделу она относится и какие законы в ней надо использовать.

3. Далее следует записать формулы, соответствующие используемым в задаче законам, не следует сразу искать неизвестную величину; надо посмотреть, все ли параметры в формуле известны.

4. Решение задачи чаще всего следует выполнять в общем виде, то есть в буквенных обозначениях. Решение «по действию» может не получиться, так как некоторые неизвестные побочные параметры могут сократиться лишь при решении до конца в общем виде.

5. Получив решение в общем виде, нужно проверить размерность полученной величины. Для этого в формулу подставить не числа, а размерности входящих в нее величин. Ответ должен соответствовать размерности искомой величины.

После проверки формулы на размерность следует подставить численные значения входящих в нее величин и произвести расчет. Далее нужно проанализировать и сформулировать ответ.

## 4.2 ЗАДАЧИ

### Занятие №1

#### ХИМИЧЕСКИЕ СВЯЗИ. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ КРИСТАЛЛОВ

##### Задачи:

1. Многие металлы могут иметь как объемноцентрированную так и гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку. Замечено, что переход от одной структуры к другой сопровождается лишь незначительным изменением объема. Предполагая, что в таком переходе объем вовсе не меняется, найти отношение  $D_1/D_2$ , где  $D_1$  и  $D_2$  – наименьшие расстояния между атомами металла соответственно в гранецентрированной и объемноцентрированной решетках.

2. Показать, что энергия решетки  $U(r_0)$ , соответствующая равновесному кратчайшему расстоянию между ионами, задается в виде:

$$U(r_0) = -N \frac{Ae^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

3. Определить показатель степени  $n$  в выражении для потенциала сил отталкивания для кристалла NaCl, если известно, что сжимаемость этого вещества равна  $3,3 \cdot 10^{12} \text{ см}^2 \cdot \text{дин}^{-1}$ , постоянная Маделунга 1,75, а равновесное расстояние между ближайшими соседями  $2,81 \text{ \AA}$ . Абсолютная величина заряда иона принята равной заряду электрона.

4. Как изменяется наименьшее равновесное расстояние между ионами и энергия решетки NaCl, если заряд иона возрастает вдвое?

5. Член  $B/r^n$  в выражении  $U = -N \left( \frac{Ae^2}{r} - \frac{B}{r^n} \right)$  для энергии решетки, соответствующий силам отталкивания, часто заменяют членом  $C \cdot \exp(-r/\rho)$ , вид которого легче объяснить теоретически. Чему равно расстояние между ближайшими соседями  $r_0 = r_0(n, \rho)$ , при котором эти два потенциала отталкивания дадут одинаковые значения энергии решетки?

6. Вычислить постоянную Маделунга  $A$  для линейной цепочки равноудаленных ионов с чередующимися положительным и отрицательными зарядами.

7. Ряды, с которыми приходится иметь дело при вычислении постоянной Маделунга, сходятся условно. Следовательно, если переставить члены, чтобы ускорить сходимость, то можно прийти к ошибочному результату. Показать, что ряд из задачи 6 можно заставить сходиться к любому значению  $S$ , если перегруппировать его члены так, чтобы вероятность  $p$  нахождения положительного члена в новом ряду была

$$p = \frac{\exp(2S)}{4 + \exp(2S)}$$

между тем как порядок членов одинакового знака останется неизменным.

Указание. Пусть  $S_n$  – сумма первых  $n$  членов переставленного ряда, среди которых имеется  $k$  положительных и  $l$  отрицательных членов, причем

$$\lim \frac{k}{n} = p \text{ и } \lim \frac{l}{n} = 1 - p \text{ (при } n \rightarrow \infty)$$

Выразить  $S_n$  через сумму

$$h_m = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \dots + \frac{1}{m} = \ln m + C + r_m,$$

где  $C=0,577\dots$  – постоянная Эйлера, а остаток  $r_m$  стремится к нулю при  $m$ , стремящемся к бесконечности. Вывести уравнение для вероятности  $p$ .

Домашние задачи:

1. Найти плотность кристаллов NaCl, CsCl.
2. 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:
  - а) давление, под которым находится кристалл;
  - б) приращение объемной плотности энергии связи кристалла.

2. Коэффициент сжимаемости кристалла NaCl в равновесном состоянии  $K=3,47 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$  ( $\alpha = 1,748$ ). Вычислить:

- а) показатель  $n$ ;
- б) энергию связи моля кристалла в равновесном состоянии.

3. Коэффициент сжимаемости кристалла CsCl в равновесном состоянии  $K=5,02 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$  ( $\alpha = 1,763$ ). Вычислить:

- а) показатель  $n$ ;
- б) энергию связи моля кристалла в равновесном состоянии.

3. Кристалл NaCl, коэффициент сжимаемости которого в равновесном состоянии  $K=3,47 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$ , подвергли всестороннему растяжению. Найти насколько увеличится расстояние между ионами, когда кристалл окажется растянутым до теоретического предела прочности (при котором отрицательное давление станет максимальным). Каково значение этого давления?

## Занятие №2

### ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ. МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ.

Устные доклады:

1. Радиационные дефекты.

## 2. Пластические свойства кристаллических тел. Хрупкое разрушение.

### Задачи

1. На основании химических представлений рассмотреть, как зависит от температуры предел растворимости одного вещества в другом для твердого раствора.

2. Сверхструктуры обычно состоят из доменов, границы которых можно увидеть в электронный микроскоп. Соприкасающиеся домены отличаются друг от друга либо по своей природе, либо по степени порядка. С помощью простых статистических рассуждений рассчитать зависимость этого порядка от температуры для сплава АВ с ОЦК структурой.

3. Показать что скорость пластического сдвига для кристалла, деформирующегося путем скольжения по единственной системе скольжения определяется выражением

$$\dot{\gamma} = b \frac{1}{V} \int_l v \cdot \bar{n} dl, \quad \bar{b} - \text{вектор Бюргера скользящих дислокаций, а } \frac{1}{V} \int_l v \cdot \bar{n} dl - \text{произведение}$$

суммарной длины скользящих дислокаций в единице объема на их среднюю скорость. Вычислить отсюда скорость пластической деформации одноосного растяжения.

4. Структуру германия можно определить как кубическую элементарную ячейку со стороной  $a$ , в которой атомы занимают следующие положения : 1 – (0,0,0); 2 – (1/2,1/2,0); 3 – (1/2,0,1/2); 4 – (0,1/2,1/2); 5 – (1/4,1/4,1/4); 6 – (3/4,3/4,1/4); 7 – (3/4,1/4,3/4); 8 – (1/4,3/4,3/4). Координаты определены в долях вектором, образующих элементарную ячейку. Ближайшими соседями 5 – го атома являются четыре атома, так что атом находится в центре правильного тетраэдра, образованного первыми четырьмя атомами. Кристалл подвергнут деформации, при которой тензор конечной деформации имеет вид

$$\begin{pmatrix} \eta_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \eta_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \eta_{33} \end{pmatrix}$$

Вычислить длины связей между 5-ым атомом и окружающими четырьмя атомами и углы между направлениями этих связей в деформированном состоянии, принимая во внимание, что расстояние и углы внутри элементарной ячейки изменяются в соответствии с макроскопической деформацией.

5. Показать, что объем куба со сторонами единичной длины, параллельными координатным осям, после деформации становится равным  $V$

$$V = \begin{vmatrix} 1 + \alpha_{11} & \alpha_{21} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & 1 + \alpha_{22} & \alpha_{32} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & 1 + \alpha_{33} \end{vmatrix}$$

Домашние задачи:

1. Кристаллическая структура железа при комнатной температуре представляет собой объемноцентрированную кубическую решетку (фаза1). Она переходит в гранецентрированную кубическую решетку (фаза2) при температуре  $910^{\circ}\text{C}$ . Теплота перехода  $L = 253$  кал/моль. Добавление небольшого количества углерода понижает температуру перехода. Оценить изменение температуры перехода, обусловленное добавлением 0,1% атомарного углерода. (Растворимость углерода в гранецентрированной кубической решетке больше, чем в объемноцентрированной).

2. На основании простых энергетических соображений показать, что при соблюдении закона Гука упругая деформация тела под действием поверхностных сил не зависят от наличия в нем стационарных дислокаций. Оценить примерно, какая плотность стационарных дислокаций необходима, чтобы материал вел себя как упругий, но предварительно деформированный на 1%.

3. Решить уравнение распространения упругих волн бесконечно малой амплитуды если направление распространения: а)  $[100]$ ; б)  $[110]$ .

**Занятие №3**

**КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ. ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ.**

Устные доклады:

1. Зоны Бриллюэна.
2. Эффект Холла.

Задачи:

1. Определить колебательную энергию и теплоемкость кристалла при температуре  $T$ , считая каждый атом решетки квантовым гармоническим осциллятором и полагая, что кристалл состоит из  $N$  одинаковых атомов, колеблющихся независимо друг от друга с одинаковой частотой  $\omega$ . Упростить полученное выражение для теплоемкости при  $kT \gg \hbar\omega$  и  $kT \ll \hbar\omega$ .

2. Рассмотрим одномерную модель кристалла – цепочку из  $N$  одинаковых атомов, у которой крайние атомы неподвижны. Пусть  $a$ -период цепочки,  $m$  – масса атома,  $\beta$  –

коэффициент квазиупругой силы. Учитывая взаимодействие лишь между соседними атомами, найти:

а) уравнение колебаний данной цепочки и спектр собственных значений волнового числа;

б) зависимость частоты колебаний цепочки от волнового числа, определить максимальную частоту колебаний и соответствующую ей длину волны;

в) зависимость фазовой скорости от волнового числа и отношение фазовых скоростей, соответствующих самым длинным и самым коротким волнам;

г) число собственных колебаний цепочки в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$ .

3. Считая скорость распространения колебаний не зависящей от частоты и равной  $v$ , найти для одномерного кристалла – цепочки из  $N$  одинаковых атомов длиной  $L$  :

а) число продольных колебаний в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$ ;

б) характеристическую температуру;

в) молярную колебательную энергию и молярную теплоемкость при температуре  $T$ ; упростить полученное выражение для теплоемкости, если  $T \gg \Theta$  и  $T \ll \Theta$ .

4. Вычислить с помощью формулы Дебая:

а) отношение  $\Delta E/E_0$ , где  $\Delta E$  – энергия, которую необходимо сообщить кристаллу при нагревании от 0 К до  $\Theta$ ;  $E_0$  – энергия нулевых колебаний;

б) энергию, которую необходимо сообщить молю кристалла алюминия, чтобы нагреть его от  $\Theta/2$  до  $\Theta$ .

5. Вычислить характеристическую температуру и энергию, нулевых колебаний у серебра, если известно, что при температурах 16 и 20 К его теплоемкость равна соответственно 0,87 и 1,70 Дж/(К\*моль).

6. Оценить максимальные значения энергии и импульса фонона в алюминии.

7. Некоторые вещества при очень низких температурах обнаруживают теплоемкость  $C_i$ , установлено, что теплоемкость  $C_i$  обусловлена внутренними степенями свободы, в частности взаимодействием спинов с внутренними кристаллическими полями. Полагая, что каждый атом независимо от других может ориентироваться со своим спином параллельно или антипараллельно относительно некоторого направления и что разность энергий атома в этих состояниях равна  $\Delta E$ , найти:

а) зависимость  $C_i$  от температуры  $T$ ;

б) отношение  $kT/\Delta E$ , при котором  $C_i$  имеет максимум;

в) отношение  $C_{i\text{ макс}}/C_{\text{реш}}$  для случая, когда  $C_{i\text{ макс}}$  отвечает температуре  $T=\Theta/100$ .

8. Кристаллический алюминий массой 10 г нагревается от 10 до 20 К. пользуясь теорией Дебая, определить количество теплоты, необходимое для нагревания.

Характеристическая температура Дебая для алюминия 418 К. Считать, что условие  $T \ll \Theta_D$  выполняется.

Домашние задачи:

1. 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 зависящим от  $\omega$ , найти для плоской квадратной решетки из одинаковых атомов, содержащей  $n_0$  атомов на единицу площади:

- а) характеристическую температуру;
- б) молярную колебательную энергию и молярную теплоемкость при температуре  $T$ , упростить полученное выражение для теплоемкости при  $T \gg \Theta$  и  $T \ll \Theta$ .

2. Считая, что скорости распространения продольных и поперечных колебаний не зависят от частоты и равны соответственно  $v_1$  и  $v_2$ , найти число колебаний  $dZ$  в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$  и характеристическую температуру  $\Theta$ :

а) двумерного кристалла – квадратной решетки из  $N$  одинаковых атомов, площадь решетки  $S$ ;

б) трехмерного кристалла – кубической решетки из  $N$  одинаковых атомов, объем решетки  $V$ .

в) вычислить характеристическую температуру железа, в котором скорости распространения продольных и поперечных колебаний равны соответственно 5,85 и 3,23 км/с.

3. Используя формулу Дебая, вычислить молярную теплоемкость кристаллической решетки при температурах  $\Theta/2$  и  $\Theta$ . На сколько процентов отличается теплоемкость при температуре  $\Theta$  от классического значения?

5. В кристалле из  $N$  одинаковых атомов число фононов в интервале частот  $(\omega, \omega+d\omega)$  при температуре  $T$  равно

$$n(\omega)d\omega = 9N \left( \frac{\hbar}{k\Theta} \right)^3 \frac{\omega^2 d\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} ,$$

а) получить это выражение с помощью формулы для числа нормальных колебаний

трехмерного кристалла  $dZ_{\omega} = \frac{V}{2\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega ;$

б) определить наиболее вероятные значения энергии и частоты фононов при температуре  $\Theta/2$ ;

в) найти характер зависимости полного числа фононов в кристалле от  $T$  при  $T \ll \Theta$  и  $T \gg \Theta$ .

6. Пользуясь теорией Дебая, найти молярную теплоемкость цинка при температуре 14 К. Характеристическая температура Дебая для цинка 308 К. Считать, что условие  $T \ll \Theta_D$  выполняется.

#### Занятие №4

### ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

#### Устные доклады:

1. Ионная, электронная и дипольная тепловые поляризации.
2. Сегнетоэлектрики.

#### Задачи:

1. Вывести выражение для энергии Ферми для модели свободных электронов металла при абсолютном нуле температуры.

2. Получить с помощью теории Дебая выражение для максимальной кинетической энергии свободных электронов в металле при 0К, если их концентрация равна  $n$ .

3. Найти выражение для отношения коэффициентов теплопроводности и электропроводности для модели свободных электронов металла. Вычислить значение числа Лоренца.

4. Вычислить ток термоэлектронной эмиссии от вольфрамовой проволоки длиной 3 см и радиусом 1 мм, нагретой до 2000 °С (работу выхода для вольфрама принять равной 4,5 эВ).

5. Показать, что электромагнитная волна, падающая на поверхность металла, быстро затухает по мере проникновения в металл. Вычислить классическую глубину скин-слоя и показать что она значительно меньше средней длины свободного пробега в чистом металле при низких температурах.

6. Согласно простой модели одновалентного металла, состоящего из точечных положительных атомных ядер, погруженных в однородный электронный газ, средняя энергия приходящаяся на один электрон, равна

$$\bar{\varepsilon} = -\frac{9}{10} \frac{e^2}{r} + \frac{3\hbar^2}{10mr^2} \left(\frac{9}{4\pi}\right)^{2/3}, \text{ где } r \text{ – радиус сферы, содержащей один электрон. Найти}$$

равновесное значение  $r_0$ , модуль всестороннего сжатия  $V$  при 0°К и скорость звука.

7. Приложенное переменное гармоническое поле ( частоты  $\omega$ ) вызывает возмущение плотности газа свободных электронов. Ограничиваясь членами первого порядка по возмущению, показать, что реакция электронного газа на такое возмущение описывается диэлектрической проницаемостью, равной

$$\varepsilon(\omega, \vec{q}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_k \frac{f_0(E_{k+q}) - f_0(E_k)}{E_{k+q} - E_k - \hbar\omega}.$$

8. Показать, что для модели свободных электронов металла диагональная компонента тензора сопротивления не зависит от магнитного поля (т.е. что эффект поперечного магнитного сопротивления отсутствует).

Домашние задачи:

1. Показать, что средняя энергия  $\bar{\varepsilon}$ , приходящаяся на одну частицу при 0 °К для электронов, подчиняющихся статистике Ферми-Дирака, равна  $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F(0)$ , где  $\varepsilon_F(0)$  - энергия Ферми при T=0 °К.

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

$$\bar{\varepsilon}_F(T) = \frac{3}{5} \varepsilon_F(0) \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{\varepsilon_F(0)} \right)^2 \right],$$

найти величину отношения  $(C_v)_{FD} / (C_v)_{кл}$  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.

2. Найти давление газа электронов, подчиняющихся статике Ферми – Дирака. Вычислить величину давления для случая меди.

3. Проводимость металла не зависит от толщины d образца до тех пор, пока средняя длина пробега  $\lambda_0$  не станет сравнимой с d

Считать рассеяние на поверхности хаотическим, показать, что если свободный пробег оканчивается на поверхности, то проводимость изменяется следующим образом:

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = \frac{\lambda}{\lambda_0} = \frac{3d}{4\lambda_0} + \frac{d}{2\lambda_0} \ln \frac{\lambda_0}{d},$$

Здесь  $\sigma$  - проводимость образца в виде тонкой плёнки;  $\sigma_0$  - проводимость массивного образца,  $\lambda$  и  $\lambda_0$  – средние длины пробега соответственно для пленки и для массивного образца.

**Занятие №5  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА**

Устные доклады:

1. Ферромагнетизм и антиферромагнетизм.

## 2. Опыт Дорффмана.

### Задачи:

1. Электрон движется в одномерном периодическом потенциальном поле, создаваемом атомами, находящимися на расстоянии  $d$  друг от друга. Показать, что волновые функции электронов могут иметь вид  $u(x)\exp(ikx)$ , где  $u(x)$  – функция той же периодичности, что и потенциал. Предполагая, что в трехмерном случае волновая функция имеет аналогичный вид:  $u(\vec{r})\exp(i\vec{k}\vec{r})$ , определить значения волнового вектора  $\mathbf{k}$  для гранецентрированной кубической решетки.

2. Показать, что на границах первой зоны Брюллиэна волновые функции свободного электрона в одномерной периодической решетке с периодом  $d$  вырождены. Показать, что если каждый атом вносит малое возмущение, то в первом приближении по возмущению волновые функции на границе зоны пропорциональны

$$\sin \frac{n\pi x}{d}, \cos \frac{n\pi x}{d}, n - \text{целое число.}$$

3. Показать, что для случая одномерной решетки существование энергетических разрывов на границе зоны Бриллюэна эквивалентно условию брегговского отражения электронных волн.

4. Рассмотреть энергетические уровни в одномерной решетке с периодом  $d$ , где потенциальная энергия имеет вид

$$V = V_0 \text{ при } -b \leq x \leq 0,$$

$$V = 0 \text{ при } 0 \leq x \leq (d-b),$$

$$V(x+d) = V(x)$$

Определить значения энергии для верхнего края первой зоны и нижнего края второй зоны на границе зон, если  $V_0 = 0,1$ ;  $d = 8$  и  $b = 3$  ат. ед.

5. Доказать теорему Блоха для трехмерной решетки.

### Домашние задачи:

1. Пусть в трёхмерной кубической решётке (в единице объёма) содержится  $N$  атомов, причём каждый из атомов имеет  $Z$  валентных электронов.

Вывести выражение для радиуса сферы Ферми (в обратной решётке) в приближении свободных электронов. Для случая двумерной квадратной решётки построить (в обратной решётке) поверхность Ферми для атомов с одним, двумя, тремя и четырьмя валентными электронами. Изобразить поверхность Ферми в первой зоне Бриллюэна для случая, когда на атом приходится четыре электрона.

2. Показать, что в случае, когда движение электрона в кристалле можно рассматривать как распространение плоской волны  $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$ , квант  $\hbar\vec{k}$  соответствует импульсу. Показать, что если на кристалл действует внешнее электрическое поле, то скорость изменения импульса в зависимости от времени такова, что электрон может рассматриваться как частица, обратная масса которой является тензорной величиной, имеющей компоненты

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}.$$

3. Найти выражение для структурного фактора и вычислить его для решётки, имеющей гексагональную плотноупакованную структуру. Показать, что для этой структуры ширина энергетической щели для состояний, соответствующих гексагональной грани зоны Бриллюэна, обращается в ноль.

## Занятие №6 ДИЭЛЕКТРИКИ

### Устные доклады:

1. Парамагнетизм и диамагнетизм твердых тел.
2. Магнитный резонанс.

### Задачи:

1. Шар из диэлектрического материала помещен в однородное электрическое поле  $E_0$ . Вычислить:

- 1) напряженность поля внутри малой сферической полости в центре шара;
- 2) поле в лоренцевой полости внутри диэлектрика. (считать, что структура диэлектрика такова, что поляризация внутри лоренцевой полости непосредственно не влияет на поле в самой полости).

2. Чтобы определить время релаксации  $\tau$  полярного диэлектрика (при заданной температуре), в некотором интервале частот проведены измерения  $\epsilon''$ . Из полученных результатов выяснилось, что  $\tau$  соответствует частоте значительно большей, чем предсказывает теория для указанного интервала частот. Показать, что если наблюдаемая частотная зависимость описывается функцией  $\epsilon'' = (L - Mf^2)f$  ( $f$  – частота), то  $\tau^2 = M / 4\pi^2 L$ .

3. Пусть в плазме при низком давлении концентрация свободных электронов равна  $n$ . Показать, что частотная зависимость диэлектрической проницаемости плазмы описывается формулой  $\epsilon_r = 1 - \frac{ne^2}{4\pi f^2 m \epsilon_0}$ , где  $f$  – частота электромагнитного поля ( $\omega = 2\pi f$ ). Рассмотреть, как распространяется через эту плазму электромагнитное излучение различных частот.

4. Плоскопараллельный конденсатор заполнен изолирующим жидким диэлектриком. В диэлектрике неизбежно присутствуют частицы примеси, и это может привести к электрическому пробое.

а) Пусть малая сферическая частица примеси, обладающая электропроводностью, соприкасается с одной из пластин конденсатора и захватывает заряд, достаточный для того, чтобы ее собственный потенциал уравновесил потенциал электрода. Показать, что время которое потребуется для того, чтобы эта частица дошла до второй обкладки, обратно пропорционально квадрату приложенного напряжения и не зависит от размера частицы.

б) Пусть к одной из обкладок прилипло маленькое полусферическое инородное тело с очень высокой диэлектрической проницаемостью. Показать, что напряженность электрического поля в вершине полусферы примерно втрое больше, чем средняя напряженность в конденсаторе.

5. В идеально непроводящий кристалл введена примесь в количестве один примесный атом на каждые  $10^6$  атомов основного вещества. Каждый атом примеси вводит по одному носителю тока с зарядов равным заряду электрона. Пусть число атомов основной решетки кристалла (на единицу объема) равно  $10^{28} \text{ м}^{-3}$ . Установлено, что при частоте 1 МГц примесные носители вносят в  $\epsilon''$  вклад  $\Delta \epsilon'' = 10$ . Определить коэффициент диффузии примеси и проводимость вещества.

6. Основные параметры пьезоэлектрика можно связать друг с другом двумя уравнениями  $S = Ed + s_E T$ ,  $D = \epsilon_T E + Td$ . Доказать, что постоянная  $d$  в этих выражениях одинаковая. Две противоположные грани кубика из пьезоэлектрического материала металлизированы и соединены проводом. Куб медленно деформируется внешним давлением, а затем соединительный провод размыкается и давление снимают. Показать, что высвобождаемая в этой системе электростатическая энергия в  $k^2$  раз больше механической энергии, затраченной на сжатие, причем  $k^2 = d^2 / s_E \epsilon_T$ .

#### Домашние задачи:

1. Чтобы сравнивать пригодность различных материалов для данного частного применения, удобно пользоваться понятием коэффициента качества (добротность). Пусть некий диэлектрик собираются применить для накопления электрической энергии. Проводимость  $\sigma$  диэлектрика принимается равной нулю, но пробивное напряжение предполагается конечным. Показать, максимальная энергия, которую можно накопить в конденсаторе с таким диэлектриком, зависит от объема диэлектрика и пробивного напряжения, но не зависит от геометрии конденсатора. В общем случае проводимостью диэлектрика пренебрегать нельзя. Вывести выражение для добротности в двух случаях:  $\sigma = 0$  и  $\sigma \neq 0$ .

2. В камере, в которой создан вакуум, находится некоторое количество двухатомных молекул. К ней приложено внешнее электрическое поле  $E_0$ . Показать, что результирующая поляризация системы молекул зависит от ориентации молекул по отношению к полю. Если молекулы газа полярные, эффект ориентации при помощи сильного электрического поля можно сделать более заметным, особенно при низких температурах. Оптические показатели преломления такого газа для света, поляризованного перпендикулярно к направлению преимущественной ориентации осей молекул и параллельно этому направлению – различны. Вывести выражение для разности показателей преломления, предполагая, что «длина» двухатомной молекулы  $l$  и что у обоих атомов, входящих в эту молекулу, электронная поляризуемость одинаковая.

3. К конденсатору приложено переменное напряжение постоянной амплитуды. Конденсатор заполнен полярным диэлектриком. Время релаксации  $\tau$  при данной температуре известно. Вывести выражение для тепловых потерь в зависимости от частоты и показать, что максимальное значение  $\epsilon''$  приходится на частоту  $\omega_{\text{рел}}$  ( $\omega_{\text{рел}} = 1/\tau$  – частота релаксации), при которой потери составляют половину своего максимального значения.

### **Занятие №7**

### **СВОЙСТВА ОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ.**

#### Устные доклады:

1. Сверхпроводимость. Высоко температурная проводимость.
2. Эффекты Джозефсона.

#### Задачи:

1. Вывести закон действующих масс для концентраций основных и неосновных носителей в полупроводнике, предполагая, что для носителей тока в зоне проводимости и в валентной зоне, так же как и для классических свободных частиц, применима статистика Максвелла – Больцмана и что функция плотности состояний параболическая для обеих зон. Эффективные массы  $m_n^*$  (для электронов) и  $m_p^*$  ( для дырок) считать известными и постоянными.

2. Явления, возникающие при добавлении в полупроводник донорных или акцепторных примесей, можно объяснить, предполагая, что каждый атом донора (или акцептора) приводит к появлению локального энергетического уровня в запрещенной зоне чуть ниже дна зоны проводимости (или чуть выше потолка валентной зоны), с которого электрон (или дырка) легко возбуждается при термической ионизации.

Обосновать эту картину исследованием водородоподобного атома, погруженного в однородную изотропную диэлектрическую среду. Атом донора считать пятивалентным, полагая, что внутри решетки четыре валентных электрона осуществляют химическую связь, а свободный пятый валентный электрон находится в кулоновском поле положительного ионного остова (примесного центра); диэлектрическую проницаемость среды считать равной диэлектрической проницаемости полупроводникового кристалла ( $\epsilon = 16$  для Ge,  $\epsilon = 12$  для Si). В частности, рассчитать размер электронных орбит и энергию ионизации основного состояния. Можно использовать боровскую теорию водородного атома с круговыми электронными орбитами.

3. В полупроводнике, в котором все донорные и акцепторные атомы ионизированы, найти концентрации электронов  $n_0$  и дырок  $p_0$ , выразив их через концентрации донорных и акцепторных примесей  $N_d$ ,  $N_a$  и через концентрацию собственных носителей  $n_i$ .

4. Рассматривая кристалл как сосуд, содержащий фононный газ, и используя приближения теории теплоемкости Дебая, показать, что для температур, больших по сравнению с температурой Дебая, число акустических фононов в единице объема составляет  $9NT/2\Theta$  ( где N – число атомов решетки в единице объема, а  $\Theta$  – температура Дебая).

Затем полуколичественно показать, что в полупроводниковом кристалле для температур, больших по сравнению с температурой Дебая, рассеяние электронная или дырки на акустическом фононе можно рассматривать аналогично взаимодействию электронная или дырки с нейтральной частицей, масса которой намного больше эффективной массы электрона или дырки. Показать, что при такой трактовке мы приходим к независимости среднего свободного пробега от скорости.

6. Образец примесного полупроводникового кристалла p – типа вырезан в виде прямоугольного параллелепипеда и помещен в однородное постоянное магнитное поле  $B_0$ , как показано на рис. 1.

Показать, что проводимость образца уменьшается с увеличением магнитного поля. В частности, если  $\omega_0\tau_p \ll 1$  ( $\omega_0 = eB_0 / m_p^*c$ ) и средняя длина свободного пробега не зависит от скорости, то

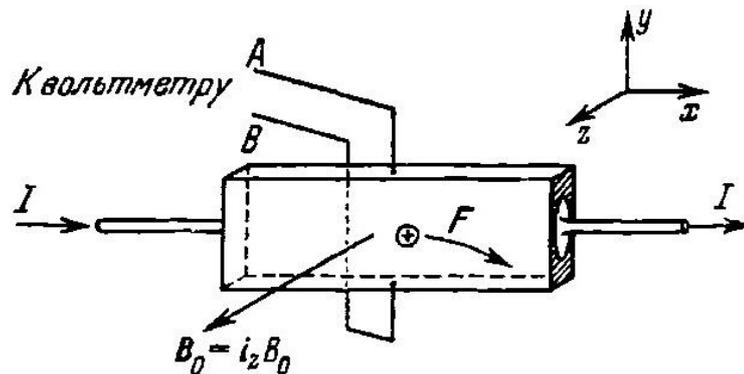


Рис. 1 – Образец p – типа в однородном магнитном поле.

$$\sigma(B_0) = \sigma_0 \left( 1 - \frac{e^2 B_0^2 \lambda^2}{m_p^* c^2 kT} \frac{4 - \pi}{8} \right), \sigma_0 - \text{проводимость в отсутствие магнитного поля, } \lambda -$$

средняя длина свободного пробега. Предполагается, что эффективная масса изотропна и, следовательно, изоэнергетические поверхности в импульсном пространстве имеют сферическую форму.

7. Выразить концентрации равновесных носителей тока  $n_0$  и  $p_0$  в однородном невыржденном полупроводнике через энергию уровня Ферми, отсчитывая последнюю от дна зоны проводимости или потолка валентной зоны. Определить квазиуровни Ферми при инжекции неравновесных носителей.

8. Инжекция избыточных неосновных носителей заряда через p-n переход в примесный полупроводник обычно не нарушает нейтральности материала. Обсудить количественные стороны этого утверждения.

#### Домашние задачи:

1. Найти энергию Ферми для собственного полупроводника, принимая, что статистика Максвелла-Больцмана применима и для зоны проводимости, и для валентной зоны.

2. Показать, что в схеме опыта, показанной на рис. 1 на клеммах А и В появляется напряжение, которое соответствует электрическому полю  $E_y = \frac{1}{p_0 e c} \left( \frac{\bar{\tau}^{-2}}{(\tau)^2} \right)$  при условии, что

$\bar{\omega}^2 \tau_p^2 \ll 1$  (эффект Холла). Показать, что когда длина среднего свободного пробега не зависит от скорости, то  $\frac{\bar{\tau}^{-2}}{(\tau)^2} = \frac{3\pi}{8}$ .

3. Показать, что подвижности электронов и дырки связаны с соответствующими коэффициентами диффузии соотношениями Эйнштейна

$$D_n = \mu_n kT / e, \quad D_p = \mu_p kT / e.$$

Принять, что длина среднего свободного пробега для электронов и дырок не зависит от скорости.

### Занятие №8

### ДИАМАГНЕТИЗМ И ПАРАМАГНЕТИЗМ

#### Устные доклады:

1. Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов. Теория Гинзбурга – Ландау.
2. Притяжение между электронами. Куперовские пары.
3. Теория Бардина – Купера - Шриффера.

#### Задачи:

1. Рассмотреть электрон, движущийся по круговой орбите вокруг ядра с зарядом  $+e$ . Используя формулу для силы Лоренца, получить выражение для силы, действующей на электрон в присутствии магнитного поля, и показать, что круговая частота электрона равна

$$\omega = -\frac{eH}{2mc} \pm \left[ \left( \frac{eH}{2mc} \right)^2 + \frac{e^2}{mr^2} \right]^{1/2}. \text{ Оценить величину каждого из слагаемых правой части}$$

уравнения и сделать соответствующие приближения для расчета ларморовой частоты.

2. Рассчитать значение  $\bar{r}^2$  для электрона в атоме водорода в основном состоянии. Сравнить эту величину с квадратом радиуса боровской орбиты электрона в атоме водорода. Рассчитать диамагнитную восприимчивость моля атомарного водорода.

3. Атом со сферически симметричным распределением электронного заряда помещен во внешнее магнитное поле. Показать, что индуцированный диамагнитный ток создает в точке, где находится ядро, поле  $\Delta H = -\frac{eH}{3mc^2} \varphi_E(0)$ , где  $\varphi_E(0)$  - электростатический потенциал в этой точке.

4. Пусть магнитное поле направлено вдоль оси z. Показать, что для каждого из следующих трех видов выбора векторного потенциала:

а)  $A_x = -\frac{1}{2}Hy, A_y = -\frac{1}{2}Hx, A_z = 0$ ;

б)  $A_x = -Hy, A_y = 0, A_z = 0$ ;

в)  $A_x = 0, A_y = Hx, A_z = 0$

мы получим одно и тоже значение для магнитного момента свободного электронного газа.

5. Рассмотреть свободный электронный газ в магнитном поле, задаваемом векторным потенциалом, для случаев, указанных в предыдущей задаче. Пусть  $L_x$  и  $L_y$  - размеры образца металла в направлениях x и y соответственно. Рассчитать кратность вырождения уровней гармонического осциллятора в предположении, что центр осциллятора находится в объеме металла.

6. Рассмотреть парамагнитный газ, состоящий из одинаковых молекул, в предположении, что каждая молекула обладает постоянным магнитным моментом  $\mu$  и что при наложении магнитного поля возможны любые ориентации магнитного момента относительно направления поля. Рассчитать намагниченность в общем случае и в случае, когда выполняется условие  $\mu H / kT \ll 1$ .

#### Домашние задачи:

1. Рассчитать магнитную восприимчивость моля газообразного гелия в основном состоянии. Использовать атомную функцию  $\Psi(r_1, r_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \exp(-\frac{Z'(r_1 + r_2)}{a_0})$ .

2. Записать классическую статистическую сумму Z для электронного газа в виде интеграла и показать, что по классической теории магнитная восприимчивость такого газа равна нулю.

3. Для парамагнитного одноатомного газа (число атомов  $1 \text{ см}^3$  равно N,  $L = 0$ ,  $S = 1/2$ ) рассчитать свободную Энергию Гиббса  $G = E - TS$  для случая, когда большинство атомов находится в наинижем энергетическом состоянии. Найти значение магнитной восприимчивости  $\chi$ , воспользовавшись тем, что в случае термодинамического равновесия свободная энергия Гиббса минимальна.

4. Для случая нулевого поля найти магнитную восприимчивость системы частиц двух типов 1 и 2; каждый тип частиц имеет дублетный спиновый уровень. Внутренняя энергия подсистемы 1 равна  $\epsilon_1$ , а подсистемы 2-  $\epsilon_2$ , причем  $\epsilon_1 > \epsilon_2$ , разность  $\epsilon_1 - \epsilon_2$  обозначим  $\Delta\epsilon$ .

## ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ

не предусмотрены.

### 5. ПРИМЕРНЫЙ ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

#### Вариант №1

1. Определить показатель степени  $n$  в выражении для потенциала сил отталкивания для кристалла NaCl, если известно, что сжимаемость этого вещества равна  $3,3 \cdot 10^{12} \text{ см}^2 \cdot \text{дин}^{-1}$ , постоянная Маделунга 1,75, а равновесное расстояние между ближайшими соседями 2,81 Å. Абсолютная величина заряда иона принята равной заряду электрона.

2. Показать, что объем куба со сторонами единичной длины, параллельными координатным осям, после деформации становится равным  $V$

$$V = \begin{vmatrix} 1 + \alpha_{11} & \alpha_{21} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & 1 + \alpha_{22} & \alpha_{32} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & 1 + \alpha_{33} \end{vmatrix}$$

3. Используя формулу Дебая, вычислить молярную теплоемкость кристаллической решетки при температурах  $\Theta/2$  и  $\Theta$ . На сколько процентов отличается теплоемкость при температуре  $\Theta$  от классического значения?

4. Найти энергию Ферми для собственного полупроводника, принимая, что статистика Максвелла-Больцмана применима и для зоны проводимости, и для валентной зоны.

## 6. ПРИМЕРНЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ЗНАНИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Примерные тестовые задания по проверке остаточных знаний по дисциплине  
«Физика конденсированного состояния вещества» для специальности 010701  
25 заданий  
время тестирования – 80 минут

Инструкция: все задания имеют одну и ту же форму - с выбором одного правильного ответа из трех

1. По характеру межатомных сил все твердые тела разделяют на
  - 1) металлические, ковалентные, ионные и молекулярные;
  - 2) полупроводники, металлы и диэлектрики;
  - 3) проводники, изоляторы, полуметаллы.
  
2. Первый потенциал ионизации это
  - 1) энергия, необходимая для отрыва электрона от нейтрального атома;
  - 2) энергия, необходимая для отрыва электрона от иона;
  - 3) энергия, необходимая для отрыва валентного электрона от нейтрального атома.
  
3. К точечным дефектам относятся
  - 1) дефекты по Шоттки и Френкелю;
  - 2) дислокации;
  - 3) границы зерен, стенки доменов, поверхность кристалла.
  
4. Концентрация дефектов по Шоттки определяется по формуле
  - 1)  $n = N \exp(-\frac{E}{kT})$ ;
  - 2)  $n = \sqrt{NN'} \exp(-\frac{E}{2kT})$ ;
  - 3)  $n = \frac{N}{2} \exp(-\frac{E}{kT})$ .
  
5. Одним из важнейших свойств дислокаций является то, что
  - 1) их количество не зависит от температуры;
  - 2) их количество не зависит от механической обработки;
  - 3) их количество не зависит от примесей.

6. Механические свойства твердых тел определяются

- 1) силами, действующими между атомами или молекулами, составляющими твердое тело;
- 2) кристаллической структурой твердого тела;
- 3) количеством дислокаций, присутствующих в твердом теле.

7. Связь между условными и истинными деформациями выражается формулой

$$1) l = \ln \frac{l_k}{l_0};$$

$$2) l = \ln(1 + \varepsilon);$$

$$3) \varepsilon = \frac{(l_k - l_0)}{l_0}$$

8. Тензор деформации определяется по формуле

$$1) \begin{vmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{vmatrix};$$

$$2) \begin{vmatrix} e_{11} & 1/2(e_{12} + e_{21}) & 1/2(e_{13} + e_{31}) \\ 1/2(e_{21} + e_{12}) & e_{22} & 1/2(e_{23} + e_{32}) \\ 1/2(e_{31} + e_{13}) & 1/2(e_{32} + e_{23}) & e_{33} \end{vmatrix};$$

$$3) \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix}.$$

9. Обобщенный закон Гука для изотропного тела устанавливает

- 1) линейную зависимость между компонентами тензора напряжений и каждым компонентом тензора деформаций;
- 2) связь между компонентами тензора напряжений и деформаций для удлинений и сдвигов;
- 3) линейную связь между компонентами тензора деформаций и всеми компонентами тензора напряжений.

10. Волновое уравнение движения для упругих волн, распространяющихся вдоль одномерной струны, имеет вид

$$1) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{E}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2};$$

$$2) \rho \frac{\partial^2 x_i}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j};$$

$$3) M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n).$$

11. Волнами сжатия и растяжения являются

- 1) продольные волны;
- 2) поперечные волны;
- 3) упругие волны.

12. Какой ученый в своей теории теплоемкости предполагал, что твердое тело является совокупностью гармонических осцилляторов, энергия которых квантована по Планку

- 1) Планк;
- 2) Дюлонг-Пти;
- 3) Эйнштейн.

13. Выражение для теплоемкости твердого тела при низких температурах определяется по формуле

$$1) C_V = \gamma_E T + \gamma_D T^3;$$

$$2) C_V = \gamma_D T^3 + \gamma_D T^2;$$

$$3) C_V = 3R.$$

14. Потенциальная энергия совокупности частиц, составляющих твердое тело, складывается

- 1) из попарного взаимодействия электронов с электронами, ядер с ядрами и электронов с ядрами;
- 2) из взаимодействия электронов с кристаллической решеткой и между собой;
- 3) из энергии притяжения электронов с ядрами.

15. В адиабатическом приближении, которое используется для решения уравнения Шредингера, предполагают что

- 1) все ядра покоятся;

- 2) все электроны внутренних оболочек образуют вместе с ядром покоящийся атомный остаток, и уравнение Шредингера записывается только для валентных электронов;
- 3) потенциальную энергию взаимодействия электронов можно заменить потенциальной энергией взаимодействия электрона с эффективным полем, в котором каждый электрон движется независимо.

16. Зона Бриллюэна это

- 1) области в пространстве, построенные на векторах обратной решетки, в которых имеются физически эквивалентные состояния;
- 2) многогранник минимального объема, построенный в  $\vec{k}$ -пространстве;
- 3) области в пространстве построенные на векторах  $2\pi a^*$ ,  $2\pi b^*$ ,  $2\pi c^*$ .

17. Эффективная масса электрона отражает

- 1) движение свободного электрона в кристалле;
- 2) влияние периодического поля решетки на движение электрона в кристалле под действием внешней силы;
- 3) движение свободного электрона помещенного во внешнее поле.

18. В теории электропроводности металлов Друде электронный газ считался

- 1) классическим;
- 2) квантовым объектом;
- 3) зонным объектом.

19. Результирующая электропроводность собственных полупроводников определяется

- 1) суммой электронной и дырочной компонент электропроводности;
- 2) концентрацией и подвижностью носителей зарядов;
- 3) подвижностью зарядов.

20. Выделяют следующие виды поляризации диэлектриков

- 1) электронная, ионная, дипольная, тепловая;
- 2) упругая электронная, ионная и дипольная, тепловая электронная, ионная и дипольная;
- 3) электронная упругая, ионная упругая, дипольная упругая, тепловая.

21. Диамагнетизм является универсальным магнитным свойством так как

- 1) он связан с орбитальным движением электронов в атоме и поэтому присущ всем веществам;
- 2) не зависит от температуры и возрастает пропорционально порядковому номеру элемента;
- 3) все электроны связаны с атомами.

22. Парамагнетизм обнаруживают атомы, которые

- 1) имеют частично заполненные электронные оболочки;
- 2) имеют полностью заполненные электронные оболочки;
- 3) имеют не заполненные d оболочки.

23. К ферромагнетикам относятся вещества, у которых магнитные моменты атомов

- 1) ориентированы случайным образом;
- 2) упорядоченно-паралельны друг другу;
- 3) ориентированы попарно.

24. В сверхпроводниках наступает идеальный диамагнетизм при

- 1)  $T < T_c$ ; ( $T_c$  – температура сверхпроводящего состояния)
- 2)  $T > T_c$ ;
- 3)  $T = T_c$ .

25. Собственное поглощение фотонов в твердых телах связано

- 1) с переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости;
- 2) с поглощением энергии световой волны колебаниями кристаллической решетки;
- 3) с переходами электронов внутри соответствующих зон.

## 7. ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ БИЛЕТЫ

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

### Билет № 1

1. Спонтанное и индуцированное излучение. Твердотельные лазеры.
2. Колебания атомов трехмерной решетки.
3. Свойства диэлектриков. Дипольная упругая поляризация.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

### Билет № 2

1. Физические свойства аморфных твердых тел. Структура аморфных твердых тел.
2. Свойства диэлектриков. Ионная упругая поляризация.
3. Колебания одномерной решетки с базисом.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

### Билет № 3

1. Аморфные полупроводники. Применение аморфных полупроводников.
2. Свойства диэлектриков. Электронная упругая поляризация.
3. Упругие волны в монокристаллах.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 4**

1. Аморфные диэлектрики. Аморфные металлы.
2. Колебания атомов кристаллической решетки. Одномерные колебания однородной струны.
3. Эффект Холла.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 5**

1. Рекомбинационное излучение в полупроводниках.
2. Свойства диэлектриков. Поляризация диэлектриков.
3. Хрупкое разрушение.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 6**

1. Поглощение света кристаллами.
2. Электрические свойства твердых тел. Свойства твердых тел в сильных электрических полях.
3. Пластические свойства кристаллических твердых тел.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 7**

1. Теория Бардина-Купера\_Шриффера.
2. Тензоры напряжений и деформации, обобщенный закон Гука.
3. Электрические свойства твердых тел. Электропроводность диэлектриков.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 8**

1. Оптические свойства твердых тел. Виды взаимодействия света с твердым телом. Оптические константы.
2. Электрические свойства твердых тел. Собственная проводимость полупроводников.
3. Колебания одноатомной линейной цепочки.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 9**

1. Теория Гинзбурга-Ландау. Притяжение между электронами. Куперовские пары.
2. Механические свойства твердых тел.
3. Электрические свойства твердых тел. Проводимость примесных полупроводников.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 10**

1. Электронный вклад в теплоемкость. Поглощение электромагнитного излучения. Квантования магнитного потока.
2. Заполнение зон электронами. Металлы, диэлектрики, полупроводники.
3. Радиационные дефекты.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 11**

1. Сверхпроводимость. Высокотемпературная сверхпроводимость.
2. Энергетический спектр электронов в кристалле. Модель Кронига-пенни.
3. Дефекты в твердых телах. Классификация дефектов.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 12**

1. Теория сверхпроводимости Ф. и Г. Лондонов.
2. Напряженное и деформированное состояние твердых тел. Упругость. Закон Гука для изотропных и анизотропных твердых тел.
3. Свойства диэлектриков. Электронная упругая поляризация.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 13**

1. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Зоны Бриллюэна. Поверхность Ферми.
2. Энергия связи. Молекулярные, ионные, ковалентные, металлические кристаллы.
3. Эффекты Джозефсона.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 14**

1. Природа парамагнетизма. Диамагнетизм и парамагнетизм твердых тел.
2. Тепловые точечные дефекты. Равновесная концентрация точечных дефектов.
3. Уравнение Шредингера для твердого тела. Одноэлектронное приближение. Функции Блоха.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 15**

1. Дислокации. Контур и вектор Бюргерса. Энергия дислокаций.
2. Классификация твердых тел по величине электропроводности.
3. Энергетический спектр некристаллических твердых тел.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 16**

1. Сверхпроводимость. Критическое магнитное поле. Кристаллическая структура и изотопический эффект.
2. Диффузия в твердых телах.
3. Классификация твердых тел.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 17**

1. Теплопроводность металлов. Учет вклада свободных электронов.
2. Межатомное взаимодействие. Основные типы связей в твердых телах.
3. Сверхпроводимость. Нулевое сопротивление. Температура сверхпроводящего перехода.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 18**

1. Обменное взаимодействие и его роль в возникновении ферромагнетизма.
2. Теплопроводность, обусловленная атомными колебаниями.
3. Принципы строения конденсированных систем, ближний и дальний порядок.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 19**

1. Теплопроводность твердых тел.
2. Собственная проводимость полупроводников. Свойства твердых тел в сильных электрических полях.
3. Магнитный резонанс.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 20**

1. Ферромагнетизм. Молекулярное поле Вейсса.
2. Тепловое расширение твердых тел.
3. Предмет физики конденсированного состояния. Основные понятия. Краткие исторические сведения.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 21**

1. Электрические свойства твердых тел. Основные свойства металлов.
2. Тепловые свойства твердых тел.
3. Эффективная масса электрона.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 22**

1. Природа диамагнетизма.
2. Электрические свойства твердых тел. Электропроводность металлов.
3. Теплоемкость твердых тел. Закон Дюлонга-Пти.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 23**

1. Теория теплоемкости Эйнштейна.
2. Энергетические уровни примесных атомов в кристалле.
3. Опыт Дофмана.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

**Билет № 24**

1. Теория теплоемкости Дебая.
2. Свойства диэлектриков. Особенности тепловой поляризации.
3. Ферромагнитные домены.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет  
Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

**Билет № 25**

1. Связь между диэлектрической проницаемостью и поляризуемостью.
2. Свойства диэлектриков. Ионная упругая поляризация. Дипольная упругая поляризация.
3. Антиферромагнетизм и ферромагнетизм.

Амурский государственный университет  
Инженерно-физический факультет  
Физика конденсированного состояния вещества  
Специальность 010701 «Физика»  
8 семестр

Утверждаю  
Зав. кафедрой ФМиЛТ  
\_\_\_\_\_ Е.С. Астапова

**Билет № 26**

1. Магнитные свойства твердых тел. Классификация магнетиков.
2. Теплоемкость металлов. Учет вклада свободных электронов.
3. Ферромагнетизм. Синовые волны.