

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

А.П. ЧЕРНЫШЕВ

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ
ТВЕРДОГО ТЕЛА
И НАНОФИЗИКУ
СПЕЦИАЛЬНЫЙ КУРС ФИЗИКИ
КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

Утверждено Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного пособия

НОВОСИБИРСК
2019

УДК 539.2(075.8)
Ч-497

Рецензенты:

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Черепанова*
канд. техн. наук, доцент *С.В. Спунтай*

Работа подготовлена на кафедре общей физики
для студентов II курса МТФ направлений 15.03.02
и 15.03.05 дневной формы обучения

Чернышев А.П.

Ч-497 Введение в физику твердого тела и нанофизику. Специальный курс физики. Конспект лекций: учебное пособие / А.П. Чернышев. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2019. – 88 с.

ISBN 978-5-7782-4048-3

В настоящее время идет быстрое развитие элементной базы микроэлектроники. Элементная база изменяется на всех уровнях характерных размеров: от нанометровых элементов микроэлектроники, построенных с применением наночастиц, нанопроволоки и тонких пленок, до электронных компонентов с геометрическими размерами элементов порядка нескольких микрометров. Специальный курс физики позволяет познакомить студентов с основными физическими принципами, положенными в основу разработки и использования современной элементной базы микроэлектроники. Для этого студенты изучают соответствующие разделы квантовой механики, физики твердого тела и квантовой оптики. Настоящее пособие призвано помочь в изучении специального курса физики как на аудиторных занятиях, так и при самостоятельном изучении. Пособие предназначено для студентов МТФ, обучающихся по направлению 15.03.02 «Технологические машины и оборудование» и 15.03.05 «Конструкторско-технологическое обеспечение машиностроительных производств» дневной формы обучения.

УДК 539.2(075.8)

ISBN 978-5-7782-4048-3

© Чернышев А.П., 2019
© Новосибирский государственный
технический университет, 2019

1. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ РЕШЕТКИ И СТРУКТУРЫ

1.1. КЛАССИФИКАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ПО ИХ ХАРАКТЕРНОМУ РАЗМЕРУ

Основное свойство кристаллов – периодичность. Кристаллические структуры характеризуются регулярным расположением в пространстве единичных атомов или групп атомов, приводящим к дальнему порядку.

Поликристаллические структуры

Поликристаллические структуры составлены из большого количества (ансамбля) кристаллитов, имеющих кристаллическую структуру и конечные размеры. При этом структуры соседних кристаллитов ориентированы в различных направлениях. Физическое описание зависит от размеров кристаллитов. Имеются два предельных случая: бесконечный кристалл и наноструктура. Промежуточные размеры имеют микрообъекты 1–10 мкм (рис. 1.1).



Рис. 1.1. Классификация частиц вещества по характерным размерам

Нано-объекты имеют размеры 3–100 нм. Особое место занимают ультрамалые нано-объекты (УМН) с характерными размерами 1–3 нм. Физические свойства УМН отличаются от физических свойств как молекул, так и нано-объектов.

Аморфные структуры

Аморфные структуры обладают только ближним порядком, т. е. положения атомов или молекул упорядочены только в окрестности атома или молекулы (рис. 1.2).

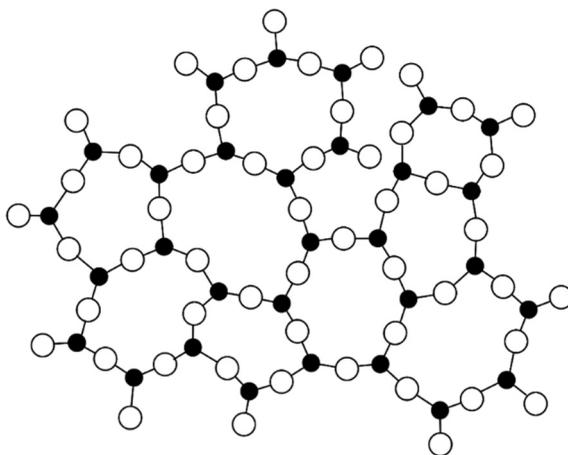


Рис. 1.2. Пример аморфной структуры.
Здесь сохраняется только ближний порядок

Стеклообразные материалы являются примером аморфных веществ. Многие вещества могут быть переведены в стеклообразное состояние путем быстрого охлаждения расплава ниже температуры стеклования. Пластические материалы (полиэтилен) – это полимерные материалы, структурные единицы которых представляют собой длинные цепи, состоящие из тысяч атомов (молекул). В полиэтилене они частично находятся в кристаллическом состоянии (50–90 %), а частично – образуют аморфные структуры (50–10 %).

1.2. РАДИАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Аналитическое и графическое представление понятия степени упорядочения обеспечивается так называемой двухчастичной функцией распределения $\rho(r)$, дающей число атомов в единице объема в зависимости от расстояния r от данного эталонного атома, который считается находящимся в начале координат. Количество атомов (частиц) ΔN на расстоянии r от эталонного атома в сферическом слое толщиной Δr равно $\Delta N = 4\pi \int_r^{r+\Delta r} r^2 \rho(r) dr$. Для одномерного случая имеем двухчастичную функцию распределения в виде

$$\rho(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \quad (1.1)$$

это сумма δ -функций Дирака, сосредоточенных на узлах решетки. Одномерный случай представлен на рис. 1.3: в $1D$ количество первых, вторых и так далее соседей одинаковое и, следовательно, высота пиков тоже одинаковая.

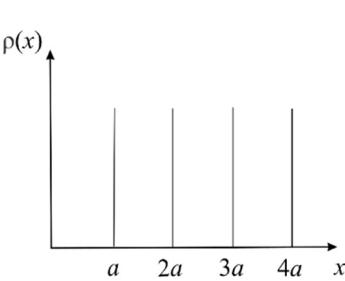


Рис. 1.3. Функция распределения $\rho(x)$ для одномерной цепочки

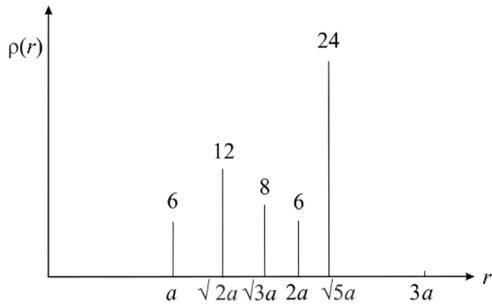


Рис. 1.4. Функция распределения $\rho(r)$ для атомов, расположенных в вершинах смежных кубов простой кубической решетки

Это не так в трех измерениях: на рис. 1.4 показана $\rho(r)$ для случая, когда атомы расположены в вершинах смежных кубов простой кубической решетки, которыми заполнено все пространство.

1.3. РАДИАЛЬНАЯ ПАРНАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ $g(r)$

Вероятность нахождения частицы на расстоянии r от любой другой выбранной частицы, с которой совмещено начало координат $r = 0$, представлена так называемой радиальной парной корреляционной функцией $g(r)$. Она определяется выражением

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N^2} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\Delta N_i(r)}{\Delta r} \right\rangle, \quad (1.2)$$

здесь V – полный объем системы; N – количество атомов в системе, $\Delta N_i(r)$ – количество атомов, находящихся на расстоянии между r и $r + \Delta r$ от i -ого атома (рис. 1.5).

Это действительно значимая функция, так как вероятность зависит от корреляций между различными расположениями атомов. В однородной системе с плотностью n , $ng(r)$ можно рассматривать как локальную плотность. С другой стороны, $ng(r)4\pi r^2 dr$ – число частиц в оболочке толщиной dr , помещенной на расстоянии r от начала координат. Координационное число (CN) – это количество ближайших соседних атомов, окружающих каждый атом. Оно равно площади первого максимума функции $g(r)$ (см. рис. 1.5):

$$CN = 4\pi n \int_0^{r_c} r^2 g(r) dr. \quad (1.3)$$

Здесь r_c – положение первого минимума на зависимости $g(r)$.

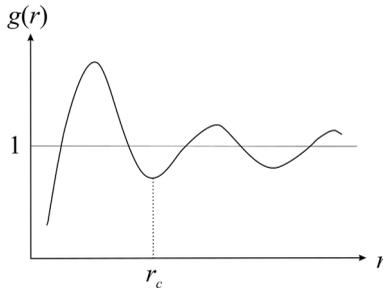


Рис. 1.5. Радиальная парная корреляционная функция

Имеет ли материал после затвердевания кристаллическую или поликристаллическую структуру, или аморфную структуру, определяется дополнительными условиями: давлением, температурой, содержанием примесей, и так далее. В то время как поликристаллические и аморфные материалы чаще всего являются результатом самопроизвольного формирования, рост монокристалла почти всегда является очень трудоемкой задачей, требующей эффективного и точного контроля над вышеуказанными параметрами. Прогресс в этих направлениях привел к революционной возможности проектирования так называемых наноструктур. Кристаллическая наноструктура – это один крошечный кристалл, размер которого может варьироваться в интервале 1–100 нм, т. е. от размера одной единственной молекулы до размера нанокристалла. В нанокристалле начинает проявляться дальний порядок в расположении элементов кристаллической структуры. Физика, описывающая эти структуры, достаточно сложна, так как она включает в себя размерные эффекты.

1.4. РЕШЕТКА БРАВЕ

Решетка Браве – бесконечный набор геометрических точек, размещенных в пространстве упорядоченно и периодически. Эти точки называются узлами решетки. Они обладают следующим свойством: при рассмотрении из любого узла решетки геометрические свойства материала (положение узлов, ориентация и типы атомов) одинаковы. Другими словами, бесконечная правильная система точек, связанных трансляциями, называется решеткой Браве (рис. 1.6).

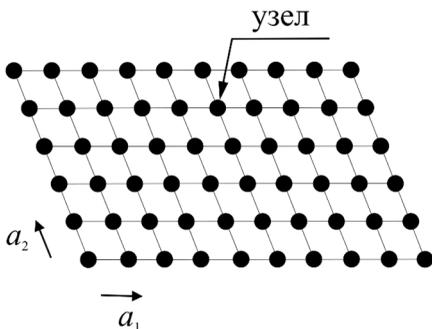


Рис. 1.6. Схема двумерной решетки Браве

Решетка Браве с базисом

Базис – это основная структурная единица, состоящая из одного или большего количества атомов (молекул, ионов и т. п.). Химический состав базиса бывает разным. Это может быть один атом как, например, в кристаллах золота и щелочных металлов, до десятков, сотен и даже тысяч атомов в кристаллических неорганических или органических веществах. Количество атомов в базисе доходит до сотен тысяч атомов в белковых кристаллах, например таких, как ДНК.

Простая последовательность построения решетки Браве

1. Пусть произвольный узел O будет узлом отсчёта или началом координат. Выберем второй узел из ближайшего окружения узла отсчёта и проведём к нему вектор \vec{a}_1 из начала координат. Это очевидно из определения решетки Браве, что есть и другие узлы, лежащие на линии, проходящей через вектор \vec{a}_1 . Положения этих узлов определяются вектором \vec{R} :

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1. \quad (1.4)$$

Здесь n_1 – целое число (положительное, отрицательное или равное нулю).

2. Снова рассмотрим ближайший к O узел, не лежащий на прямой, определяемой соотношением (1.4). И соединим его с узлом отсчёта неколлинеарным вектору \vec{a}_1 вектором \vec{a}_2 . Теперь

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2. \quad (1.5)$$

3. Рассмотрим теперь ближайший узел, не лежащий в плоскости, которой принадлежат векторы, определяемые соотношением (1.5). Соединим вектором \vec{a}_3 узел отсчёта O с этим узлом. Аналогично первым двум пунктам получаем

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3. \quad (1.6)$$

Выбор примитивной элементарной ячейки

Неоднозначность выбора примитивной ячейки (примитивной элементарной ячейки) продемонстрирована на Рис. 1.7. Показаны три способа выбора примитивной ячейки для квадратной решетки в $2D$. Структуру идеального бесконечного кристалла можно описать, задавая решетку Браве \vec{R}_n и базис – совокупность векторов \vec{r}_s , характеризующих расположение атомов внутри элементарной ячейки (индекс s нумерует атомы в элементарной ячейке). В случае, когда кристалл образован анизотропными молекулами, в базис, помимо радиус-векторов молекул \vec{r}_s , должны быть включены параметры, определяющие ориентацию молекул.

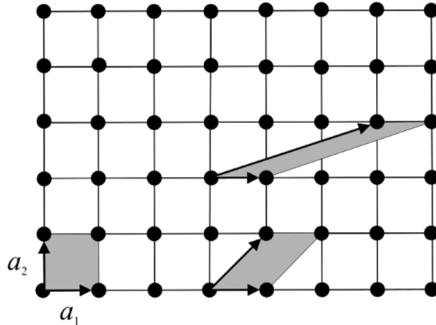


Рис. 1.7. Неоднозначность выбора примитивной решетки

Свойства решетки Браве

- 1) Трансляция на вектор \vec{R} не меняет решетку Браве.
- 2) Объем примитивной ячейки

$$V_c = \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3 = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3. \quad (1.7)$$

В простейшем случае примитивная ячейка представляет собой в $1D$ – отрезок прямой линии, в $2D$ – квадрат, в $3D$ – куб.

3) Примитивными ячейками пространство заполняется целиком, без пустот и зазоров.

4) Примитивная ячейка должна содержать только одну точку решетки. Следовательно, если n – плотность точек в решетке, то $nV_c = 1$.

5) Любой реальный кристалл может быть идентифицирован по примитивной ячейке и базису, т. е. по атомному составу и расположению атомов в примитивной ячейке.

Во многих случаях удобнее работать с условной элементарной ячейкой (см. например, рис. 1.9), которая обладает полной симметрией решетки Браве. Величины, определяющие размер элементарной ячейки (для кубических кристаллов – это одна величина a), называют постоянными решетки.

1.5. РЕШЕТКА БРАВЕ ДЛЯ ДВУМЕРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Двумерные кристаллы находят все большее применение в инновационных технологиях. Рассмотрим основные структуры двумерных кристаллов.

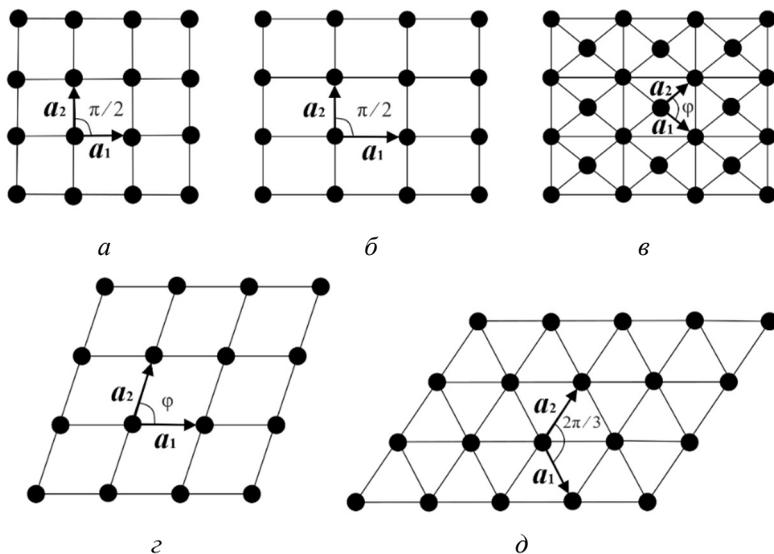


Рис. 1.8. Основные структуры двумерных кристаллов

а) квадратная: $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$. \vec{a}_1 , \vec{a}_2 расположены под углом $\varphi = \pi/2$ (рис. 1.8);

б) прямоугольная: $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$, and $\varphi = \pi/2$;

в) центрированная прямоугольная: также, как в случае б), только есть дополнительный узел в центре прямоугольника. Заметим, что это

элементарная ячейка с двумя узлами решетки, расположенными в центре и вершине прямоугольника. Ячейка, включающая более одного узла решетки и предназначенная для всех симметрий данной решетки, обычно называется условной элементарной ячейкой. В частности, здесь условная элементарная ячейка не является примитивной. Вместо этого примитивная ячейка может быть представлена путём выбора начала координат ячейки в центре прямоугольника и выбором \vec{a}_1 и \vec{a}_2 в качестве векторов, соединяющих центр с двумя вершинами одного и того же прямоугольника. В этом представлении $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$ и $\varphi \neq \pi/2$.

г) косоугольная: $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$ и $\varphi \neq \pi/2$;

д) гексагональная: $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$ and $\varphi = 2\pi/3$.

1.6. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Примеры здесь ограничены тремя значимыми и часто встречающимися типами структур, в которые кристаллизуются соединения двух элементов. Для более глубокого изучения видов кристаллических структур можно обратиться к учебнику [1]. Отдельно рассмотрим кубическую сингонию (систему). Она представлена четырьмя структурами кристаллов. Это простая кубическая, объемноцентрированная кубическая (о.ц.к), гранецентрированная кубическая (г.ц.к.) и базоцентрированная кубическая кристаллические решетки. Две из них представлены на рис. 1.9. На этом же рисунке пунктиром показаны две возможные примитивные ячейки. Как уже было показано выше (см. рис. 1.7) выбор примитивных ячеек неоднозначен. Ниже рассмотрена более сложная ситуация, когда кристалл состоит из разных атомов.

Структура CsCl

Структура *CsCl* – часто встречающаяся структура, в которую выкристаллизовываются ионные соли щелочных элементов. Очевидно, что каждый ион одного вида окружен восемью ионами другого вида. Базис решетки можно охарактеризовать векторами

$$r_1 = 0, \quad r_2 = \frac{a}{2}(\vec{e}_x + \vec{e}_y + \vec{e}_z), \quad (1.8)$$

здесь \vec{e}_x , \vec{e}_y и \vec{e}_z – единичные векторы вдоль осей x , y и z соответственно.

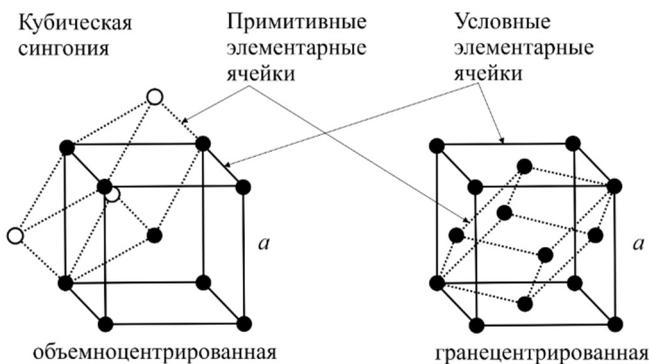


Рис. 1.9. Две структуры кристаллов кубической сингонии

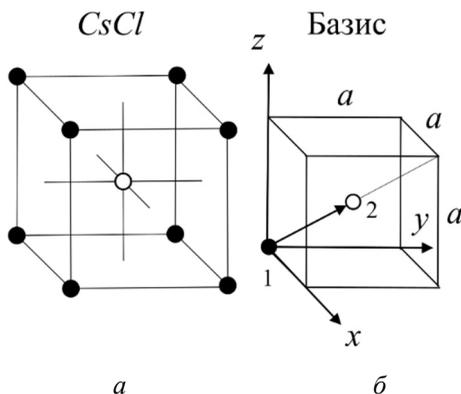


Рис. 1.10. Структура хлорида цезия. Простая кубическая решетка с двухточечным базисом

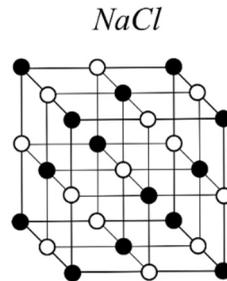
Структура хлорида цезия (рис. 1.10, *a*) – простая кубическая решетка с двухточечным базисом из ионов цезия Cs^+ и хлора Cl^- (на рис. 1.10, *b*). Таким образом, структуру $CsCl$ можно охарактеризовать как простую кубическую решетку с базисом из двух атомов. Два атома базиса, один Cs и второй Cl , находятся на $(0, 0, 0)$ и $(a/2, a/2, a/2)$. Параметр решетки $CsCl$ $a = 4,123 \text{ \AA}$. Простые геометрические соображения помогают классифицировать пары ионов, которые могут кристаллизоваться в структуру $CsCl$ в соответствии с размером их ионных радиусов R_1 и R_2 , скажем, Cs (меньший радиус) и Cl (большой радиус). Рисунок

сразу показывает, что возможные значения для R_1 и R_2 ограничены условиями $R_1 + R_2 = \sqrt{3} a/2$ и $2R_2 \leq a$. В результате получается $R_2/R_1 \leq 1/(\sqrt{3}-1)$.

Структура NaCl

Другие соли щелочных металлов кристаллизуются в структуру, именуемую структурой хлорида натрия. Структуру NaCl можно описать как гранецентрированную кубическую решетку с базисом из двух атомов (рис. 1.11).

Рис. 1.11. Структура хлорида натрия. NaCl имеет гранецентрированную кубическую решетку с базисом из двух атомов



Два атома базиса в примитивной элементарной ячейке, один Na и один Cl, находятся в $(0, 0, 0)$ и $(a/2, 0, 0)$. В условной элементарной ячейке (рис. 1.11), атомы Na находятся в $(0, 0, 0)$, $(a/2, a/2, 0)$, $(0, a/2, a/2)$ и $(a/2, 0, a/2)$, а атомы Cl находятся в $(a/2, 0, 0)$, $(0, a/2, 0)$, $(0, 0, a/2)$ и $(a/2, a/2, a/2)$. Геометрические соображения, сходные с рассмотренными для CsCl, приводят к выводу, что ионные радиусы ионных соединений, кристаллизующихся в эту структуру, должны удовлетворять условиям $R_1 + R_2 = a/2$ и $2R_2 \leq \sqrt{2} a/2$, то есть $R_2/R_1 \leq 1/(\sqrt{2}-1)$.

ZnS. Структура цинковой обманки. Алмаз

Структура сульфида цинка (цинковой обманки) – гранецентрированная кубическая решетка с двухточечным базисом из ионов цинка Zn^{2+} и серы S^{2-} (рис. 1.12). Такое же геометрическое рассмотрение, как и для CsCl и NaCl структур, приводит к условиям $R_1 + R_2 = \sqrt{3} a/4$ и $2R_2 \leq \sqrt{2} a/2$, или $R_2/R_1 \leq 1/(\sqrt{3/2}-1)$.

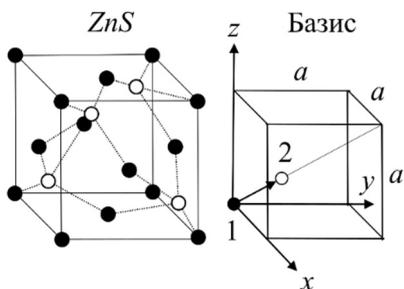


Рис. 1.12. Структура цинковой обманки и алмаза. ZnS имеет гранецентрированную кубическую решетку с двухточечным базисом

Радиусы ионов должны удовлетворять этим условиям, чтобы химическое соединение имело вероятность кристаллизироваться в структуру ZnS . Решетка алмаза состоит из атомов углерода. В решетке алмаза все атомы одинаковые и расположены так же, как и атомы цинковой обманки.

1.7. ЯЧЕЙКА ВИГНЕРА–ЗЕЙТЦА

Всегда можно выбрать примитивную ячейку так, чтобы она обладала полной симметрией решетки Браве. Такой примитивной ячейкой является ячейка Вигнера–Зейтца. Рассмотрим простейшую последовательность построения этой ячейки (рис. 1.13).

1. Выбираем произвольный узел решётки Браве и соединяем отрезками со всеми ближайшими соседними узлами (рис. 1.13, *а*).

2. Через середины этих отрезков проводим перпендикулярные отрезкам плоскости (рис. 1.13, *б*). Ограниченная плоскостями область наименьшего объема является ячейкой Вигнера–Зейтца (рис. 1.13, *в*).

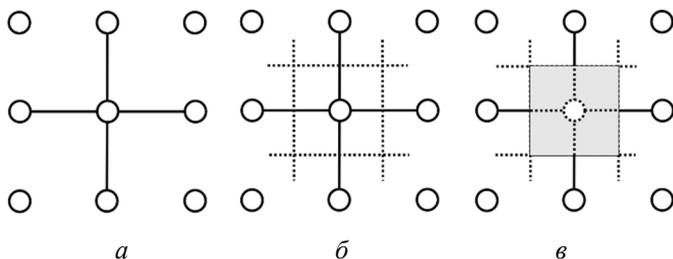


Рис. 1.13. Пример построения ячейки Вигнера–Зейтца в $2D$

Симметрия кристаллической решетки

Физические свойства вещества тесно связаны со степенью симметричности кристаллической решетки. Например, кристаллы Si имеют более высокую степень пространственной симметрии, чем кварц SiO_2 . Зато кварц является пьезоэлектриком. Точечными называются преобразования, оставляющие неподвижной хотя бы одну точку решетки Браве. Набор преобразований симметрии, который переводит решетку саму в себя, причем некоторый узел решетки остается неподвижным, называется точечной группой симметрии.

1.8 ИНДЕКСЫ МИЛЛЕРА

Задать кристаллографическую плоскость можно с помощью индексов Миллера. Рассмотрим общий случай трехмерной решетки, в которой длины примитивных векторов трансляции \vec{a}_1 , \vec{a}_2 и \vec{a}_3 в общем случае не равны друг другу, а углы между парами этих векторов в общем случае не равны $\pi/2$ (рис. 1.14).

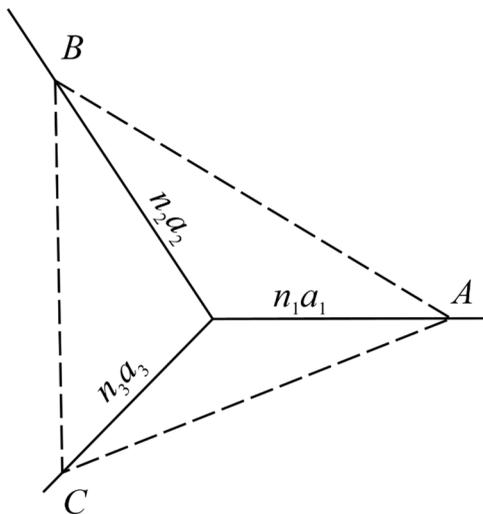


Рис. 1.14. Изображение с помощью примитивных векторов трансляции \vec{a}_1 , \vec{a}_2 и \vec{a}_3 плоскости, проходящей через точки A , B и C

Предполагается, что точки A , B и C находятся в узлах кристаллической решетки и поэтому n_1 , n_2 и n_3 – целые числа. Ниже мы рассмотрим так называемое обратное пространство. Его использование в физике твердого тела приводит к тому, что удобнее всего для обозначения кристаллографических плоскостей использовать индексы Миллера (h , k , l). Они представляют собой набор целых чисел h , k и l , выражающих отношение

$$h : k : l = n_1^{-1} : n_2^{-1} : n_3^{-1}. \quad (1.9)$$

В качестве примера на рис. 1.15 показаны некоторые плоскости и их индексы Миллера для кубических кристаллов.

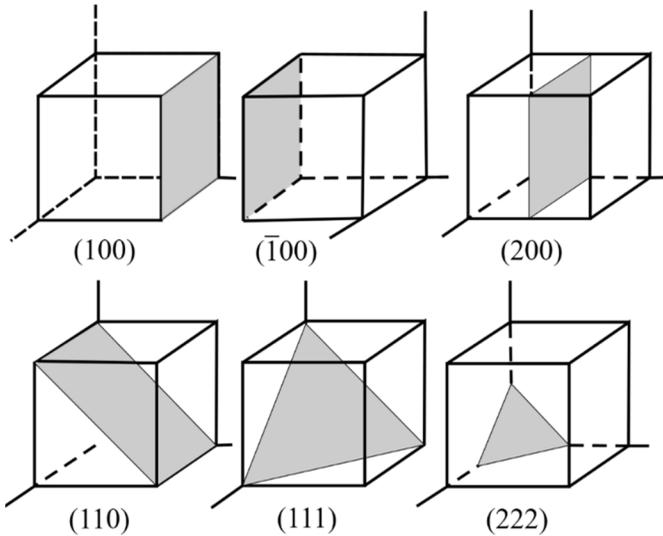


Рис. 1.15. Обозначения плоскостей в кристаллах с кубической решеткой

Если рассматриваемая плоскость пересекает ось \vec{a}_1 в области отрицательных значений координат, используют обозначение $(\bar{h}kl)$. На рис. 1.15 показаны плоскости (100) и $(\bar{1}00)$, которые связаны друг с другом трансляционной симметрией. Набор физически эквивалентных плоскостей обозначают символом $\{hkl\}$.

Гексагональные и тригональные кристаллы

Для этих видов кристаллов принято использовать набор четырех индексов Миллера, представляющих собой обратные значения координат точек пересечения плоскости с осями, направленными вдоль векторов \vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3 и \vec{a}_4 (рис. 1.16). Таким образом, плоскость можно обозначать как $(\bar{1}010)$ (рис. 1.16), где четвертый индекс связан с пересечением с осью, направленной вдоль \vec{a}_4 . Соотношения между компланарными векторами \vec{a}_1 , \vec{a}_2 и \vec{a}_3 накладывают условия на первые три индекса Миллера: их сумма должна быть равна нулю.

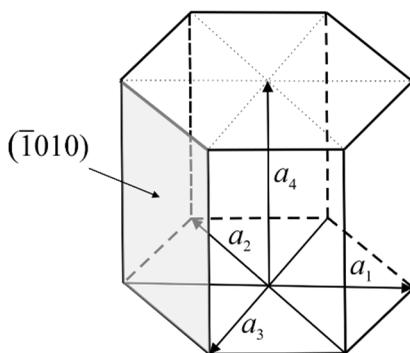


Рис. 1.16. Индексы Миллера плоскостей в гексагональных и тригональных кристаллах

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Показать, что относительная доля объема, занимаемого атомами, имеет следующие значения: для простой кубической решетки – 0,52, для объёмно-центрированной кубической решетки – 0,68, а для гранецентрированной кубической решетки – 0,74. Считать атомы твердыми шарами.

2. ДИФРАКЦИЯ ПОТОКОВ ЧАСТИЦ И РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА КРИСТАЛЛАХ

1. Длина волны должна быть порядка межатомного расстояния.
2. Три основных вида дифракции на кристаллах: дифракция фотонов рентгеновского излучения, быстрых электронов и потока нейтронов.

2.1. ВОЛНЫ ДЕ БРОЙЛЯ. ФОРМУЛА ДЕ БРОЙЛЯ

Энергия фотона:

$$E_{\phi} = \hbar\omega . \quad (2.1)$$

Из специальной теории относительности Эйнштейна известно, что энергия частицы E связана с ее импульсом \vec{p} и скоростью \vec{v} соотношением

$$\vec{p} = E \frac{\vec{v}}{c^2} . \quad (2.2)$$

Здесь c – скорость света.

Импульс фотона

Из формул (2.1) и (2.2) следует, что импульс фотона ($v = c$) определяется соотношением

$$\vec{p} = \hbar\omega \frac{c}{c^2} \vec{n} = \hbar \frac{\omega}{c} \vec{n} = \hbar \vec{k} , \quad (2.3)$$

здесь \vec{n} – единичный вектор, направленный по скорости фотона; \vec{k} – волновой вектор ($\vec{k} = (\omega/c)\vec{n}$), или

$$\lambda = 2\pi\hbar/p. \quad (2.4)$$

Гипотеза де Бройля

В 1924 г. Луи де Бройль предположил, что дуализм волна – частица является универсальным свойством материи. Каждой частице можно сопоставить волну, длина которой определяется соотношением де Бройля

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (2.5)$$

Соответственно, импульс и энергия частицы равны:

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_{dB}}, \quad E = \hbar\omega. \quad (2.6)$$

Оценка длины волны де Бройля

Для фотонов рентгеновского излучения: $\lambda = c/\nu = hc/E$ (ν – частота излучения). Длине волны 0.1 нм соответствует энергия $E \sim 12\,000$ эВ. Для потока нейтронов длина волны де Бройля определяется выражением (2.4):

$$\lambda_{dB} = h/(M_n v) = h/\sqrt{2M_n E},$$

где M_n – масса нейтрона. Длине волны 0.1 нм соответствует энергия $E \sim 0,08$ эВ. Скорость нейтронов $v \sim 4000$ м/с.

2.2. ДИФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И МОЛЕКУЛ

Опыт Дэвиссона и Джермера (Davisson and Germer)

Первое подтверждение гипотезы де Бройля было получено в 1927 году в опытах американских физиков К. Дэвиссона и Л. Джермера. Пучок электронов ускорялся в электрическом поле и падал на кристалл никеля, игравший роль пространственной дифракционной решётки.

Схема опыта Дэвиссона и Джермера показана на рис. 2.1. Сформированный в электронной пушке поток электронов отражается от поверхности монокристалла Ni , имеющего сошлифованный край. Пучок электронов направлялся перпендикулярно этому краю. Давление в установке составляло около 10^{-8} мм рт. ст. Кристалл никеля имеет гранецентрированную кубическую структуру. В его элементарной ячейке атомы расположены в вершинах и центрах граней куба, размер ребра которого равен $3,51\text{\AA}$. В опытах Дэвиссона и Джермера кристалл никеля сошлифовывался таким образом, чтобы его бомбардируемой поверхностью была плоскость (111). Детектор перемещали в плоскости падения, меняя угол θ (рис. 2.1). Отраженные электроны давали наибольший максимум под углом отражения 50° и при ускоряющем напряжении 54 В. Что соответствовало максимуму первого порядка при интерференции волны де Бройля.

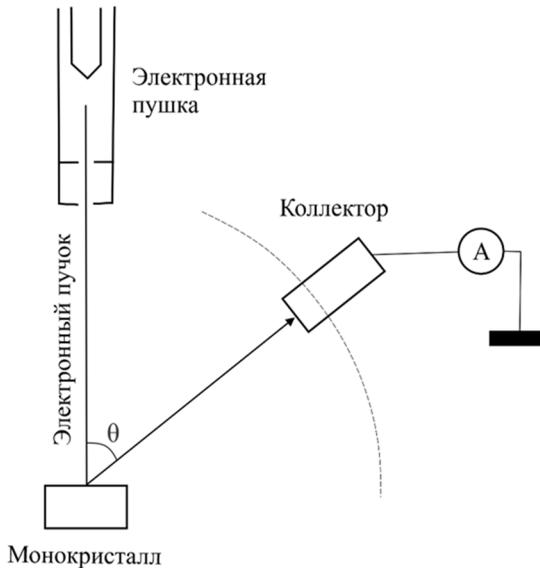


Рис. 2.1. Схема опыта Дэвиссона и Джермера

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

В опыте Дэвиссона и Джермера кристалл мог поворачиваться вокруг оси, совпадающей с направлением падающего пучка электронов. Наблюдающаяся картина рассеяния падающих электронов периодически повторялась при повороте кристалла на 120° вокруг этой оси (перпендикулярной к сошлифованной плоскости). Как это можно объяснить?

*Еще один опыт. Опыт Томсона и Рейда 1927 г.
(Thomson and Reid)*

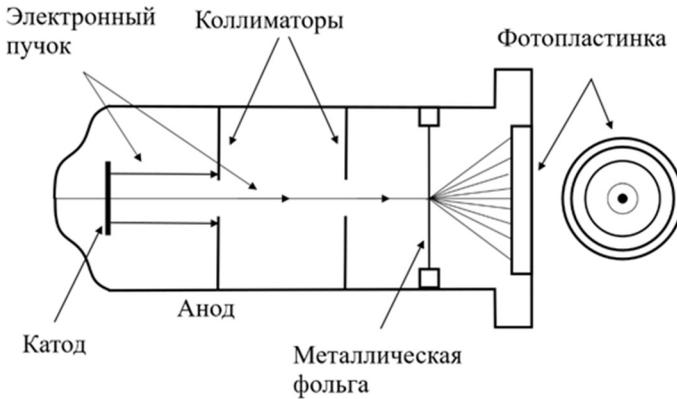


Рис. 2.2. Схема опыта Томсона и Рейда

В опыте Томсона и Рейда ускоряющее электроны напряжение составляло $U = 17,5 - 56,5$ кВ. Пучок электронов падал на золотую фольгу толщиной $0,1$ мкм. Длина волны де Бройля составляла $0,092 - 0,052$ Å. Энергия была выбрана таким образом, чтобы электроны могли пройти сквозь золотую фольгу. Кроме того, было необходимо получить хотя бы несколько дифракционных колец на фотопластинке. В опытах Томсона и Рейда была получена дифракционная картина, что подтвердило гипотезу де Бройля.

Дифракция фуллеренов ('buckyballs') и больших молекул

В 1999 году Антон Цейлингер с сотрудниками (Anton Zeilinger's group) Венского Университета наблюдали волновые свойства молекул C_{60} (buckminsterfullerenes или 'buckyballs') и молекул C_{70} . В то время

это были самые большие объекты, которые проявляли волновые свойства. Их диаметры составляли около 1 нм.

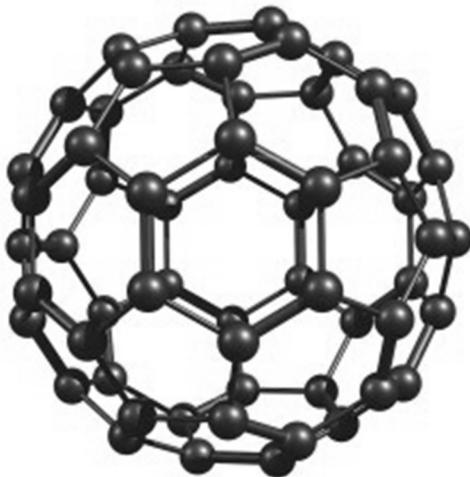


Рис. 2.3. Фуллерен C_{60}

Позднее наблюдали дифракцию и других больших молекул: тетрафенилпорфирина, диаметр которого около 2 нм и гемоглобина [2], диаметр которого также около 2 нм.

Условия наблюдения дифракции

Длина волны де Бройля должна быть по порядку величины близка к межатомному расстоянию $\lambda \approx 10^{-10}$ м. Электроны с такой длиной волны имеют энергию около 100 эВ, нейтроны – около 0.1 эВ.

2.3. ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Рентгеновское излучение имеет длину волны λ от 10^{-14} до 10^{-8} м. Для наблюдения дифракции необходимо, чтобы d было больше λ , поскольку $d \sin \alpha = k\lambda$. Это условие выполняется для кристаллических решеток. Рассмотрим действие одной цепочки атомов, параллельной оси x . Каждый атом является источником вторичных волн.

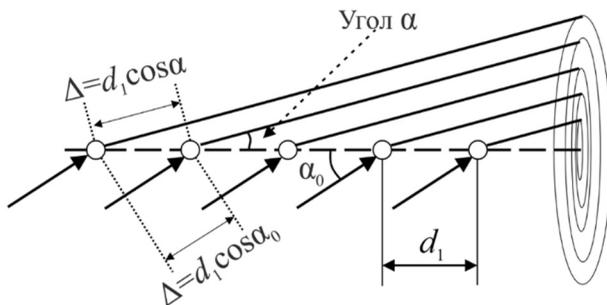


Рис. 2.4. Рассеяние рентгеновских лучей одномерной цепочкой атомов

К соседним источникам падающая волна приходит с разностью фаз

$$\delta_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta_0, \Delta_0 = d_1 \cos \alpha_0. \quad (2.7)$$

d_1 – период структуры вдоль оси x . Возникает дополнительная разность хода $\Delta = d_1 \cos \alpha$. Колебания от отдельных структурных элементов будут усиливаться для тех направлений, для которых выполняются соотношения Лауэ:

$$\begin{aligned} d_1(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= \pm m_1 \lambda, \\ d_2(\cos \beta - \cos \beta_0) &= \pm m_2 \lambda \quad (m_i = 0, 1, 2, \dots), \\ d_3(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= \pm m_3 \lambda. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Углы α , β и γ не являются независимыми. Например, в прямоугольной системе координат они связаны соотношением

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1. \quad (2.9)$$

Система, состоящая из четырех уравнений (2.8) и (2.9) может быть разрешена только для определенных значений длины волны λ при фиксированных значениях α_0 , β_0 и γ_0 . Наоборот, при фиксированном значении λ (монохроматическое излучение) систему можно сделать совместной варьируя значения α_0 , β_0 и γ_0 , т. е. поворачивая пространственную структуру относительно направления падающего пучка.

Формула Вульфа–Брэггов

Разность хода двух волн, отразившихся от соседних слоев, равна $2d \sin \theta$ (рис. 2.5), где d – период идентичности кристалла в направлении, перпендикулярном к рассматриваемым слоям, θ – угол, дополнительный к углу падения и называемый углом скольжения падающих лучей. Направления, в которых получают дифракционные максимумы, определяются условием (формула Брэгга–Вульфов)

$$2d \sin \theta = \pm m\lambda \quad (m = 1, 2, \dots). \quad (2.10)$$

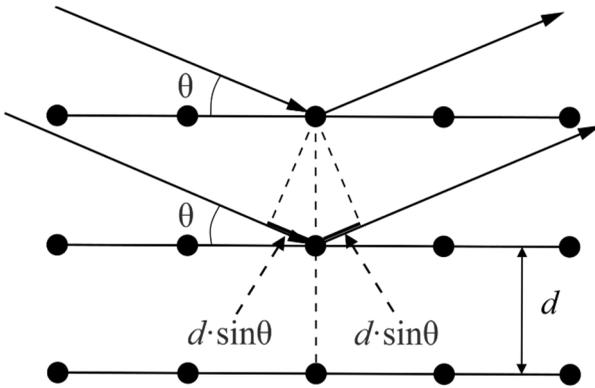


Рис. 2.5 Отражение рентгеновских лучей от кристаллографических плоскостей кристаллов

Дифракция рентгеновских лучей от кристаллов находит два основных применения – для рентгеновской спектроскопии и рентгеноструктурного анализа. Выделяют два основных метода исследования кристаллического вещества с помощью рентгеновского излучения: 1) *Метод Лауэ*: «белый» рентгеновский пучок направляется на монокристалл; 2) *Метод Дебая–Шерера*. В этом методе используется монохроматическое рентгеновское излучение и поликристаллические образцы. Исследуемое вещество измельчается в порошок, из которого прессуется образец в виде проволочки.

2.4. ИНТЕНСИВНОСТЬ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ НА КРИСТАЛЛАХ

Заряженные частицы вещества ускоряются электрическим полем электромагнитной волны, после чего сами становятся источником излучения. Пусть $\Delta E = E_0 - E_1$, где E_0 – энергия фотона (нейтрона, электрона) падающего излучения; E_1 – энергия рассеянного фотона (нейтрона, электрона). Рассеяние бывает упругое $\Delta E = 0$ и неупругое $\Delta E \neq 0$. Рассмотрим упругое рассеяние излучения атомами кристаллической решетки.

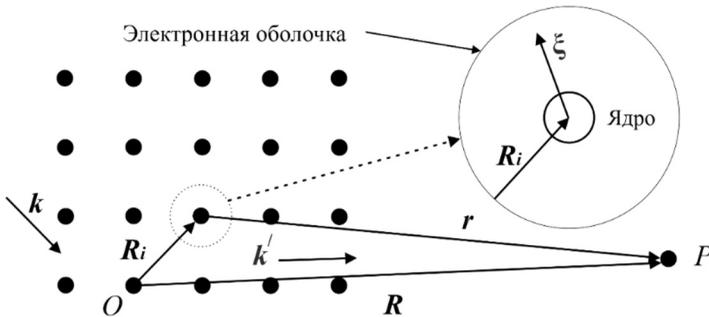


Рис. 2.6. O – начало координат, P – точка, где расположен детектор, \vec{R}_i – вектор решетки Браве, показывающий положение излучающего атома, $\vec{\xi}$ – вектор, показывающий положение элемента заряда этого атома, который и является источником вторичных сферических волн

Будем считать, что кристалл достаточно мал, чтобы можно было не учитывать затухание падающей волны внутри кристалла. Обычно в условиях эксперимента расстояние от кристалла до детектора рассеянного излучения R много больше размеров самого кристалла, поэтому справедливо соотношение

$$\frac{\rho}{R} \ll 1. \quad (2.11)$$

Здесь ρ и R – модули соответствующих векторов. Для того, чтобы физические свойства кристалла не зависели от его размеров, примем также, что количество поверхностных атомов пренебрежимо мало по сравнению

с количеством атомов, находящихся в объеме кристалла. На рис. 2.6 изображена кристаллическая решетка без базиса. Рассмотрим более общий случай решетки с базисом. В этом случае вектор $\vec{\rho}$ имеет вид

$$\vec{\rho} = \vec{R}_i + \vec{d}_\mu + \vec{\xi}. \quad (2.12)$$

В этом уравнении \vec{R}_i – вектор прямой решетки, указывающий положение примитивной ячейки, \vec{d}_μ – показывает положение атомных ядер внутри примитивной ячейки, $\vec{\xi}$ – показывает положение элемента заряда по отношению к ядру атома.

Пусть на атоме сосредоточен заряд Q_ρ , который становится источником вторичной сферической волны

$$E_\rho \propto Q_\rho \frac{e^{ikr}}{r} e^{i(\vec{k}\vec{\rho} - \omega t)}, \quad (2.13)$$

по теореме косинусов имеем, что

$$r^2 = \rho^2 + R^2 - 2\rho R \cos \theta, \quad (2.14)$$

здесь θ – угол между векторами \vec{R} и $\vec{\rho}$, $\vec{k} = \vec{k}'$. Поскольку в условиях эксперимента выполняется соотношение (2.11), то, извлекая корень и пренебрегая членами порядка $(\rho/R)^2$, получим

$$r = R \left(1 - \frac{\rho}{R} \cos \theta \right) = R - \rho \cos \theta. \quad (2.15)$$

Полное поле, попадающее в детектор

Подставляя (2.15) в (2.13), получаем

$$E_\rho \propto \left(\sum_\rho Q_\rho \frac{e^{-ik\rho \cos \theta}}{R} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \right) e^{i(kR - \omega t)}. \quad (2.16)$$

Фаза $k\rho \cos \theta$ может быть записана в векторном виде как $\vec{k}'\vec{\rho}$, где вектор \vec{k}' направлен вдоль \vec{R} и имеет модуль k . Обозначим $\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$,

тогда $E \propto \sum_{\rho} Q_{\rho} e^{-i\Delta\vec{k}\vec{\rho}}$. Множитель $1/R$ опущен, т. к. не зависит от распределения заряда и для данного геометрического расположения является величиной постоянной, множитель $e^{i(kR-\omega t)}$ также опущен, так как не зависит от распределения заряда.

Рассчитаем интенсивность рассеянного кристаллом излучения. Учтем тот факт, что длина волны излучения сравнима с межатомным расстоянием и размерами самих атомов. Следовательно, каждый элемент заряда $\rho_{\mu}(\vec{\xi})d\vec{\xi}$ является источником вторичных сферических волн. Здесь μ – идентификатор атома в кристаллической решётке. В соответствии с формулой (1.6) $\vec{R}_i = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, а координаты элемента заряда описываются выражением (2.12), поэтому

$$E \propto \sum_{n_1, n_2, n_3} \sum_{\mu} \int_{V_{a, \mu}} d\vec{\xi} \rho_{\mu}(\vec{\xi}) e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_i + \vec{d}_{\mu} + \vec{\xi})} = S_R F_G. \quad (2.17)$$

S_R – структурный фактор (амплитуда рассеяния), который определяется решеткой Браве:

$$S_R = \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_i}, \quad (2.18)$$

F_G – структурный фактор рассеяния, который определяется распределением атомов (ионов) в базисе и имеет вид

$$F_G = \sum_{\mu} f_{\mu}(\Delta\vec{k}) e^{-i\Delta\vec{k}\vec{d}_{\mu}}. \quad (2.19)$$

Как следует из выражения (2.17), структурный фактор рассеяния показывает, во сколько раз интенсивность лучей, рассеянных решеткой с базисом, отличается от интенсивности лучей, рассеянных той же атомной плоскостью кристалла с простой решеткой. Функция

$$f_{\mu}(\Delta\vec{k}) = \int_{V_{a, \mu}} d\vec{\xi} \rho_{\mu}(\vec{\xi}) e^{-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}}. \quad (2.20)$$

называется атомным структурным фактором (форм-фактором атома). В этом выражении $V_{a, \mu}$ – атомный или ионный объём атома (иона) с

идентификатором μ . Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей I пропорциональна квадрату модуля амплитуды рассеянного излучения:

$$I \propto |E|^2 \propto |S_R F_G|^2 \quad (2.21)$$

и определяется произведением двух множителей S_R и F_G . Последний множитель, в свою очередь, зависит от форм-фактора атома $f_\mu(\Delta\vec{k})$.

2.5. РАСЧЕТ АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ РЕШЕТКОЙ БРАВЕ

Пусть количество узлов вдоль векторов \vec{a}_1 , \vec{a}_2 и \vec{a}_3 равно N_1 , N_2 и N_3 соответственно. Подставляем $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, тогда

$$\sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}} = \sum_{n_1=0}^{N_1-1} (e^{-i\Delta\vec{k}\vec{a}_1})^{n_1} \sum_{n_2=0}^{N_2-1} (e^{-i\Delta\vec{k}\vec{a}_2})^{n_2} \sum_{n_3=0}^{N_3-1} (e^{-i\Delta\vec{k}\vec{a}_3})^{n_3}. \quad (2.22)$$

Сумма геометрической прогрессии равна

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N-1} x^n &= (1-x^N)/(1-x). \\ \sum_{n_1=0}^{N_1-1} (e^{-i\Delta\vec{k}\vec{a}_1})^{n_1} &= \frac{1-e^{-iN_1\Delta\vec{k}\vec{a}_1}}{1-e^{-i\Delta\vec{k}\vec{a}_1}}. \\ I &= \left| \frac{1-e^{iN_1\Delta\vec{k}\vec{a}_1}}{1-e^{i\Delta\vec{k}\vec{a}_1}} \right|^2 = \frac{\sin^2(N_1\Delta\vec{k}\vec{a}_1/2)}{\sin^2(\Delta\vec{k}\vec{a}_1/2)}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Главные максимумы достигаются, когда выполняются условия Лауэ:

$$\Delta\vec{k}\vec{a}_1 = 2\pi r_1, \quad \Delta\vec{k}\vec{a}_2 = 2\pi r_2, \quad \Delta\vec{k}\vec{a}_3 = 2\pi r_3. \quad (2.24)$$

Здесь r_1 , r_2 и r_3 – целые числа или ноль. Интенсивность при этих условиях пропорциональна N_1^2 . Функция $f(x) = \sin^2(Nx)/\sin^2(x)$ представлена на рис. 2.7.

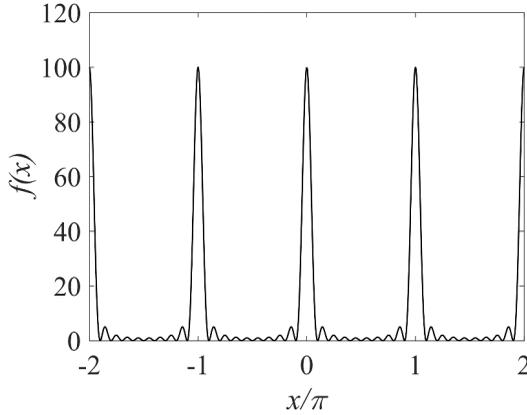


Рис. 2.7. График функции $f(x)$

2.6. (ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ) СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР И ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

Структурный фактор рассеяния характеризует во сколько раз интенсивность лучей, рассеянных плоскостями со сложной решеткой, отличается от интенсивности лучей, рассеянных той же атомной плоскостью кристалла с простой решеткой. Пусть решетка содержит s базисных атомов, положение которых относительно начала координат ячейки определяется векторами

$$\vec{d}_\mu = u_\mu \vec{a}_1 + v_\mu \vec{a}_2 + w_\mu \vec{a}_3. \quad (2.25)$$

Структурный фактор можно записать в виде:

$$F_G = \sum_{\mu=1}^s f_\mu e^{-i\Phi_\mu}, \quad (2.26)$$

где Φ_μ – разность фаз лучей, рассеянных на μ -том атоме и на атоме, находящемся в начале координат ячейки.

$$\Phi_\mu = \Delta \vec{k} \vec{d}_\mu = (\vec{k}' - \vec{k}) \vec{d}_\mu. \quad (2.27)$$

Обратная решётка

Рассмотрим вектор

$$\Delta \vec{k} = r_1 \vec{b}_1 + r_2 \vec{b}_2 + r_3 \vec{b}_3, \quad (2.28)$$

где r_1 , r_2 и r_3 – целые числа из условий Лауэ. Векторы b_1 , b_2 и b_3 предстоит определить. Для этого подставим (2.28) в (2.24). В результате имеем, что (2.28) является решением (2.24) только в том случае, если выполняются соотношения

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi, \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_1 = 0, \quad \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_1 = 0, \quad \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_2 = 0, \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = 2\pi, \quad \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_2 = 0, \\ \vec{b}_1 \cdot \vec{a}_3 = 0, \quad \vec{b}_2 \cdot \vec{a}_3 = 0, \quad \vec{b}_3 \cdot \vec{a}_3 = 2\pi. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Из первого столбца (2.29) следует, что вектор \vec{b}_1 должен быть перпендикулярен к векторам \vec{a}_2 и \vec{a}_3 . Так как векторное произведение $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ по определению есть вектор перпендикулярный к каждому сомножителю, то имеем

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}. \quad (2.30)$$

Это и есть основные векторы обратной решетки. Каждому кристаллу соответствуют две решетки: прямая решетка Браве и обратная решётка. Эти решетки связаны между собой соотношениями (2.30). Обратная решетка – это решетка в \vec{k} -пространстве (пространстве Фурье). Положение узлов обратной решетки и векторы обратной решетки \vec{G} в пространстве Фурье определяются соотношением:

$$\vec{G} = r_1 \vec{b}_1 + r_2 \vec{b}_2 + r_3 \vec{b}_3. \quad (2.31)$$

Обратная решетка – удобный инструмент для описания взаимодействия излучения с веществом. Действительно, выражение для \vec{G} (2.31) совпадает с выражением для $\Delta \vec{k}$ (2.28), поэтому если выполняется соотношение

$$\Delta \vec{k} = \vec{G}, \quad (2.32)$$

то выполняются условия дифракции Лауэ. Составим скалярное произведение

$$\begin{aligned} \vec{G}\vec{R} &= (r_1\vec{b}_1 + r_2\vec{b}_2 + r_3\vec{b}_3)(n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3) = \\ &= 2\pi(r_1n_1 + r_2n_2 + r_3n_3) \end{aligned}$$

Это выражение эквивалентно выражению

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1.$$

Теперь соотношение (2.26) можно переписать в виде

$$F_G = \sum_{\mu=1}^s f_{\mu} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{d}_{\mu}}, \quad (2.33)$$

где использовано соотношение (2.27):

$$\Phi_{\mu} = \Delta\vec{k}d_{\mu} = \vec{G}d_{\mu} = 2\pi(r_1u_{\mu} + r_2v_{\mu} + r_3w_{\mu}). \quad (2.34)$$

Перепишем соотношение (2.32) в виде

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}. \quad (2.35)$$

Это соотношение называется правилом отбора для волнового вектора рассеянной волны. Оно выражает закон сохранения импульса (см. рис. 2.8).

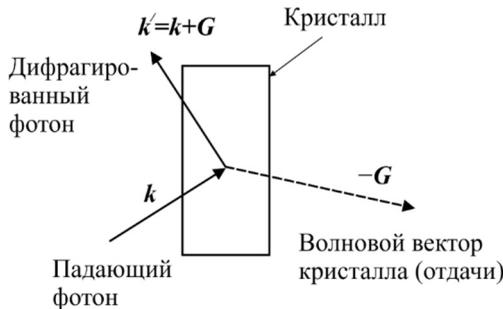


Рис. 2.8. Закон сохранения импульса при отражении

Кристалл получает импульс отдачи $-\hbar\vec{G}$, поэтому справедливо соотношение, выражающее закон сохранения импульса: $\vec{k} = \vec{k}' - \vec{G}$. Обе части соотношения (2.35) можно возвести в квадрат:

$$k'^2 = k^2 + 2\vec{k}\vec{G} + G^2. \quad (2.36)$$

Поскольку по определению $k'^2 = k^2$, то имеем

$$2\vec{k}\vec{G} + G^2 = 0. \quad (2.37)$$

2.7. ЗОНА БРИЛЛЮЭНА

Построим примитивную ячейку Вигнера-Зейтца для обратной решётки. Такая ячейка называется первой зоной Бриллюэна. Заменим \vec{G} на $-\vec{G}$ и преобразуем (2.37) к виду

$$\vec{k} \frac{\vec{G}}{2} = \left(\frac{G}{2} \right)^2. \quad (2.38)$$

Чтобы построить ячейку Вигнера-Зейтца обратной решетки построим плоскость, перпендикулярную к вектору трансляции обратной решетки проходящую через его середину. Как видно из рис. 2.9, произвольный вектор \vec{k} , проведенный до этой плоскости из точки, выбранной за начало координат, будет удовлетворять условию дифракции. Построенная плоскость образует часть границы зоны Бриллюэна.

Одномерная кристаллическая решетка

Вектор прямой решетки имеет вид (рис. 2.10):

$$\vec{a}_1 = a\vec{e}_x, \quad \vec{a}_2 = \vec{e}_y, \quad \vec{a}_3 = \vec{e}_z.$$

Здесь \vec{a}_2 и \vec{a}_3 – вспомогательные векторы. Отсюда имеем, что

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_x.$$

Здесь отброшены вспомогательные векторы \vec{b}_2 и \vec{b}_3 (рис. 2.10).

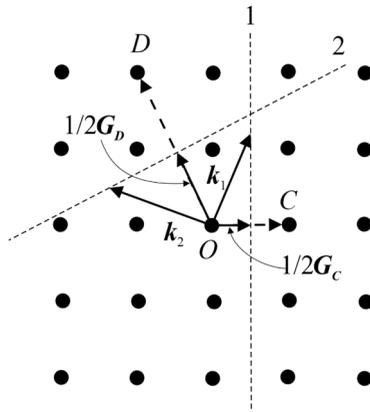


Рис. 2.9. Пример построения части границы зоны Бриллюэна

Линейная кристаллическая решетка

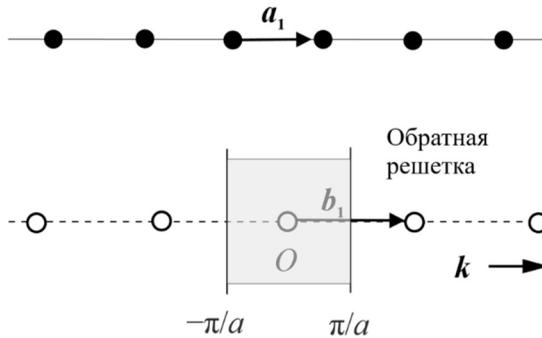


Рис. 2.10. Построение одномерной обратной решетки

Простая кубическая решётка

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_x, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_y, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_z.$$

Следовательно, обратная решётка для простой кубической прямой решётки со стороной a является простой кубической решёткой со стороной $2\pi/a$.

Объёмно-центрированная кубическая решётка

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_x + \vec{e}_y), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_y + \vec{e}_z), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_x + \vec{e}_z).$$

Таким образом, обратная решетка по отношению к объёмно-центрированной кубической решетке со стороной a – это гранецентрированная кубическая решетка с боковыми сторонами $4\pi/a$.

Гранецентрированная кубическая решётка

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_x + \vec{e}_y - \vec{e}_z), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(-\vec{e}_x + \vec{e}_y + \vec{e}_z), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_x - \vec{e}_y + \vec{e}_z).$$

Таким образом, обратная по отношению к обычной ячейке прямой г.ц.к. решетки со стороной a , является о.ц.к. решетка с боковыми сторонами $4\pi/a$.

2.8. РАСЧЕТ СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА БАЗИСА. ЗАКОНЫ ПОГАСАНИЯ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ СТРУКТУР

Выберем некоторое произвольное отражение от семейства плоскостей (hkl) , где h , k и l – индексы Миллера. Тогда из соотношений (2.33) и (2.34) получим

$$\Phi_\mu = \vec{G} \vec{d}_\mu = 2\pi(hu_\mu + kv_\mu + lw_\mu), \quad (2.39)$$

$$F_G = \sum_{\mu=1}^s f_\mu e^{-i2\pi(hu_\mu + kv_\mu + lw_\mu)}. \quad (2.40)$$

Условия, при которых структурный фактор базиса обращается в ноль, называют правилами погасания.

1. Рассмотрим сначала примитивную кубическую решетку. Базис этой решетки $[(0,0,0)]$.

$$F_G = f_1 e^{-i2\pi(h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0)} = f_1.$$

Таким образом, структурный фактор базиса ни при каких условиях в ноль не обращается.

2. Кубическая объёмно-центрированная решетка
 Базис такой решетки состоит из двух атомов с координатами

$$\left[(0,0,0); \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \right].$$

Отсюда имеем

$$\begin{aligned} F_G &= f_1 e^{2\pi i(h \cdot 0 + k \cdot 0 + l \cdot 0)} + f_2 e^{2\pi i(h \cdot 0,5 + k \cdot 0,5 + l \cdot 0,5)} = \\ &= f_1 + f_2 \cos \pi(h+k+l) \end{aligned}$$

Пусть $f_1 = f_2$, тогда структурный фактор не равен нулю, если сумма $(h+k+l)$ равна четному числу.

2.9. АТОМНЫЙ ФАКТОР РАССЕЯНИЯ (ФОРМ-ФАКТОР АТОМА)

Если бы все электроны атома рассеивали волну в одной фазе, то отношение амплитуды волны, рассеянной атомом, к амплитуде волны, рассеянной электроном при тех же условиях, т. е. для той же длины волны и под тем же углом, равнялось бы числу электронов в атоме. Это отношение называется атомным фактором рассеяния и показывает отличие рассеяния атомом от рассеяния одним электроном.

Величина атомного структурного фактора (форм-фактора атома) зависит от пространственного распределения электронов атома, от длины волны и угла рассеяния излучения. Выше уже было дано определение форм-фактора атома в виде

$$f_\mu(\vec{G}) = \int_{V_{a,\mu}} d\vec{\xi} \rho_\mu(\vec{\xi}) e^{-i\vec{G}\vec{\xi}}, \quad (2.41)$$

где интегрирование проводится по объему атома, а ρ_μ – количество электронов в единице объема в точке, положение которой определяется вектором $\vec{\xi}$. Пусть угол между $\vec{\xi}$ и \vec{G} равен φ , тогда $\vec{G}\vec{\xi} = G\xi \cos \varphi$. И пусть распределение электронной плотности по объему атома обладает сферической симметрией относительно начала координат. Тогда имеем, что

$$f_{\mu} = 2\pi \int_0^{R_a} d\xi \xi^2 \rho(\xi) \int_{-1}^{+1} d(\cos \varphi) e^{-iG\xi \cos \varphi} = 2\pi \int_0^{R_a} d\xi \rho(\xi) \xi^2 \frac{e^{iG\xi} - e^{-iG\xi}}{iG\xi} .$$

Здесь R_a – радиус атома. После очевидных преобразований имеем:

$$f_{\mu} = 4\pi \int_0^{R_a} d\xi \rho(\xi) \xi^2 \frac{\sin(G\xi)}{G\xi} . \quad (2.42)$$

Рассмотрим предельный случай, когда заряд сконцентрирован в начале координат, т. е. подынтегральное выражение отлично от нуля только в бесконечно малой окрестности начала координат. Тогда $G\xi \rightarrow 0$ и имеем предельный случай

$$\lim_{G\xi \rightarrow 0} \frac{\sin G\xi}{G\xi} = 1 .$$

Отсюда следует, что для всех G вместо соотношения (2.42) справедливо равенство

$$f_{\mu} = 4\pi \int_0^{R_a} d\xi \rho(\xi) \xi^2 = Z ,$$

где Z – число электронов в атоме. Поэтому можно сказать, что f_{μ} – это отношение амплитуды излучения, рассеянного реальным распределением электронов в атоме, к амплитуде излучения, рассеянного одним электроном, расположенным в точке.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Пусть ромбическая решетка имеет три примитивных осевых вектора

$$\vec{a} = 5\hat{x} , \quad \vec{b} = 2\hat{y} , \quad \vec{c} = \hat{z} ,$$

модули которых выражаются в Å. Определить размеры и форму первой зоны Бриллюэна.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Рассчитать структурный фактор алмаза и получить правила погасания для алмаза. Кристаллическая структура алмаза представлена на рис. 1.12. Если элементарной ячейкой является обычный куб, то базис содержит 8 атомов:

а) найти структурный фактор этого базиса;

б) найти нулевые значения геометрического структурного фактора и показать, что индексы разрешенных для структуры алмаза отражений удовлетворяют равенству $h + k + l = 4n$, где все индексы являются четными целыми числами, а n – произвольное целое число.

3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФЕРМИОНОВ И БОЗОНОВ ПО ЭНЕРГИЯМ

3.1. МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СОСТОЯНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Если рассматриваемая система подчиняется законам классической механики, то ее микросостояние задается координатами и импульсами каждой частицы, составляющей систему. Это очень громоздкое описание и его нельзя практически осуществить. Задача не менее сложная и для термодинамической системы, требующей квантовомеханического рассмотрения. Состояние такой системы задается огромным числом квантовых чисел, равным числу ее степеней свободы. Это описание состояния системы также невозможно осуществить.

Различные состояния, отвечающие одной и той же энергии, имеют различную вероятность. Разумеется, что изолированная система будет переходить из менее вероятного состояния в более вероятное. Более вероятное состояние реализуется большим количеством микросостояний. Подсчитаем количество микросостояний. Для этого введем так называемое μ – пространство. Это пространство имеет шесть измерений: p_x, p_y, p_z, x, y, z . Соотношение неопределенности Гейзенберга можно записать в виде:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \approx h, \Delta p_y \cdot \Delta y \approx h, \Delta p_z \cdot \Delta z \approx h. \quad (3.1)$$

Здесь h – постоянная Планка, $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ и $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – неопределенности импульсов и координат соответственно. Минимальный объем ячейки в этом пространстве получается путем перемножения уравнений (3.1):

$$\Delta\Gamma_{\mu} = \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \Delta x \Delta y \Delta z = \Delta V_p \Delta V = h^3 = (2\pi\hbar)^3, \quad (3.2)$$

где ΔV_p и ΔV – объемы ячейки в импульсном и конфигурационном пространствах соответственно. Указание распределения частиц системы по ячейкам μ – пространства и есть задание его микросостояния. Это самое точное из возможных описаний термодинамической системы.

3.2. МАКРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СОСТОЯНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ. СТАТИСТИЧЕСКИЙ ВЕС

Макроскопическое состояние термодинамической системы определяется макроскопическими параметрами: давлением, температурой и т. п. Каждому макроскопическому состоянию соответствует множество микросостояний. Количество таких микросостояний Ω называется статистическим весом данного макросостояния.

Энтропия

Величина, которая служит для характеристики вероятности макросостояний, называется энтропией. Эта величина является функцией состояния термодинамической системы. По определению

$$S = k_B \ln \Omega, \quad (3.3)$$

здесь k_B – постоянная Больцмана ($k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К). Энтропия – величина аддитивная. Действительно, общий статистический вес двух подсистем равен $\Omega = \Omega_1 \Omega_2$. Поэтому энтропия такой системы имеет вид

$$S = k_B \ln \Omega = k_B \ln(\Omega_1 \Omega_2) = k_B \ln \Omega_1 + k_B \ln \Omega_2 = S_1 + S_2, \quad (3.4)$$

где S_1 и S_2 энтропии первой и второй подсистем соответственно. Мы здесь не учли вклад в энтропию границы между подсистемами. Этим вкладом в макроскопических системах можно пренебречь.

Сравним статистические распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака на качественном уровне (рис. 3.1). Для этого воспользуемся моделью ящиков с ячейками [5]. Частицы в ящике имеют одинаковую энергию. В каждом ящике есть ячейки, которые могут занимать

частицы. Количество ячеек в ящике можно рассматривать как кратность вырождения энергетического уровня, энергию которого имеют частицы в ящике. Разные ящики соответствуют разным энергиям.

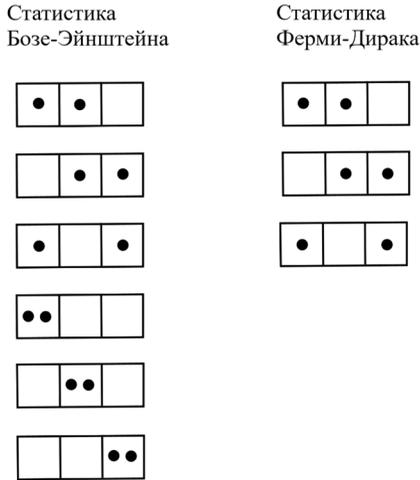


Рис. 3.1. Пример распределения бозонов и фермионов по ячейкам ($Z = 3$)

Фермионы – частицы с полуцелым спином, поэтому они подчиняются принципу Паули. Из принципа Паули следует, что в каждой ячейке может находиться только одна частица (здесь мы не учитываем спиновую переменную, которую легко учесть простым удвоением количества термодинамических состояний). Бозоны не подчиняются принципу Паули, поэтому в каждой ячейке может находиться любое количество частиц. Отсюда и различие в распределении частиц по ячейкам на рис. 3.1.

3.3. ФЕРМИОНЫ

Количество частиц – N ; количество ячеек – Z . Пусть $Z > N$. Число перестановок ячеек – $Z!$ Из них не дают новых состояний перестановки пустых ячеек между собой – $(Z - N)!$ и перестановки частиц между собой – $N!$ Поэтому статистический вес равен

$$\Omega = \frac{Z!}{N!(Z - N)!}. \tag{3.5}$$

Разобьем μ -пространство на области с одинаковой энергией E_i (подсистемы или ящики). Если энергия изменяется непрерывно, тогда μ -пространство можно разбить на области с энергией в интервале от E_i до $E_i + \Delta E_i$. В каждом таком интервале энергию можно считать постоянной. Пусть в каждый ящик попадает Z_i ячеек и N_i частиц. Тогда соотношение (3.5) можно записать в виде

$$\Omega_i = \frac{Z_i!}{N_i!(Z_i - N_i)!}. \quad (3.6)$$

Статистический вес системы равен произведению статистических весов подсистем (3.6):

$$\Omega = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{Z_i!}{N_i!(Z_i - N_i)!}. \quad (3.7)$$

Найдем наиболее вероятное распределение частиц по ячейкам. Чтобы найти такое распределение, нужно найти максимум выражения (3.7) при дополнительных условиях:

$$\sum_i N_i = N, \quad \sum_i E_i N_i = E. \quad (3.8)$$

Вместо максимума статистического веса Ω будем искать максимум энтропии S (3.3):

$$S = k_B \sum_i (\ln Z_i! - \ln N_i! - \ln(Z_i - N_i)!). \quad (3.9)$$

Воспользуемся формулой Стирлинга $\ln N! \approx N \ln N - N$. Формула Стирлинга справедлива при $N \gg 1$ и $Z \gg 1$. Преобразуя с помощью формулы Стирлинга выражение для энтропии (3.9) получим:

$$\begin{aligned} S &= k_B \sum_i \{ Z_i \ln Z_i - Z_i - N_i \ln N_i + N_i - \\ &\quad - (Z_i - N_i) \ln(Z_i - N_i) + (Z_i - N_i) \} = \\ &= -k_B \sum_i [N_i \ln N_i + (Z_i - N_i) \ln(Z_i - N_i)] + \text{const}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

В соотношении (3.10) константа составлена из слагаемых, которые не включают в себя N_i . Воспользуемся методом неопределенных множителей Лагранжа и образуем функцию L :

$$L = S + \alpha N - \beta E = -k_B \sum_i [N_i \ln N_i + (Z_i - N_i) \ln (Z_i - N_i)] + \\ + \text{const} + \alpha \sum_i N_i - \beta \sum_i E_i N_i, \quad (3.11)$$

здесь α , β – множители Лагранжа. Беря частные производные L по N_i , получим

$$\frac{\partial L}{\partial N_i} = k_B \ln \frac{Z_i - N_i}{N_i} + \alpha - \beta E_i = 0.$$

Из этого уравнения следует, что

$$\frac{1 - N_i / Z_i}{N_i / Z_i} = \exp \frac{\beta E_i - \alpha}{k_B}, \quad (3.12)$$

Решая уравнение (3.12) относительно величины $n_i = N_i / Z_i$, имеем

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp[(\beta E_i - \alpha) / k_B] + 1}. \quad (3.13)$$

Это выражение дает среднее количество частиц с энергией E_i . Теперь выясним физический смысл множителей Лагранжа α и β .

3.4. ВТОРОЕ НАЧАЛО ТЕРМОДИНАМИКИ. ТЕМПЕРАТУРА

Энтропия изолированной системы может только возрастать либо, по достижении максимального значения, оставаться постоянной (т. е. не убывать).

$$dS \geq 0. \quad (3.14)$$

Как следует из соотношения аддитивности (3.4), энтропия для системы из n – подсистем равна

$$S = \sum_{i=1}^n S_i. \quad (3.15)$$

Теперь рассмотрим термодинамическое определение температуры.

Пусть количество частиц в каждой подсистеме (ящике) постоянно. Тогда $dN_i = 0$. Подсистемы могут обмениваться энергией и находятся в термодинамическом равновесии. В этом случае энергия подсистемы равна $E_i^s = N_i E_i$, а функция Лагранжа имеет вид

$$L = S - \beta \sum_{i=1}^N E_i^s . \quad (3.16)$$

Из условия максимальности энтропии

$$\frac{\partial L}{\partial E_i^s} = 0 , \quad (3.17)$$

и соотношения (3.16) следует, что

$$\frac{\partial S}{\partial E_i^s} = \beta . \quad (3.18)$$

Поскольку энтропия системы аддитивна, то

$$S = S_1(E_1^s) + S_2(E_2^s) + \dots + S_M(E_M^s) , \quad (3.19)$$

Здесь M – это количество подсистем. Энтропия каждой из подсистем зависит только от ее собственной энергии, поэтому из (3.18) и (3.19) следует, что

$$\frac{dS}{dE} = \frac{\partial S_1}{\partial E_1} = \frac{\partial S_2}{\partial E_2} = \dots = \frac{\partial S_M}{\partial E_M} = \beta = \text{const} . \quad (3.20)$$

Поскольку все подсистемы находятся в тепловом равновесии, то, как показывает опыт, они имеют одинаковую температуру. Следовательно, абсолютная температура тела определяется соотношением

$$\frac{1}{T} = \frac{dS}{dE} = \beta . \quad (3.21)$$

Соотношение (3.21) показывает, что множитель Лагранжа β равен обратной температуре.

3.5. СИСТЕМЫ С ПЕРЕМЕННЫМ ЧИСЛОМ ЧАСТИЦ

Энергия E , энтропия S , свободная энергия F и энергия Гиббса G (термодинамические потенциалы) являются аддитивными величинами. Пусть система состоит из двух частей 1 и 2, тогда

$$E = E_1 + E_2, \quad S = S_1 + S_2, \quad F = F_1 + F_2, \quad G = G_1 + G_2.$$

Таким образом, если количество вещества в системе увеличивается в M раз, то и ее аддитивные величины должны увеличиться в M раз. Поэтому зависимость термодинамических потенциалов от количества частиц N в системе можно записать в виде

$$E = N\varepsilon\left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N}\right), \quad F = Nf\left(T, \frac{V}{N}\right), \quad G = Ng(T, p). \quad (3.22)$$

Из этого выражения видно, что энергия системы, свободная энергия и энергия Гиббса зависят от числа частиц, поэтому в дифференциале энергии

$$dE = TdS - pdV + \mu dN, \quad (3.23)$$

добавлен член μdN . Из уравнения (3.23) непосредственно следует, что

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{V,S}. \quad (3.24)$$

Термодинамическая величина μ называется химическим потенциалом. Аналогично изменяется вид остальных термодинамических потенциалов:

$$dF = d(E - TS) = -SdT - pdV + \mu dN, \quad (3.25)$$

$$dG = d(F + pV) = -SdT + Vdp + \mu dN. \quad (3.26)$$

Из (3.25) и (3.26) также следует, что

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{T,p}. \quad (3.27)$$

Подставив в (3.27) выражение для G из (3.22), имеем

$$\mu = g(p, T). \quad (3.28)$$

Из (3.22) также следует, что

$$G = N\mu. \quad (3.29)$$

Следовательно, химический потенциал равен удельной величине термодинамического потенциала Гиббса.

Рассмотрим замкнутую систему из двух частей (подсистемы и ее окружения), имеющих энтропии S_1 и S_2 . И пусть подсистема может обмениваться частицами с окружением. Энтропия системы должна быть максимальна по отношению к числам частиц в этих частях. Кроме этого, полное число частиц в замкнутой системе должно сохраняться: $N_1 + N_2 = N_0 = \text{const}$. Необходимое условие экстремума имеет вид:

$$\frac{\partial S}{\partial N_1} = \frac{\partial S_1}{\partial N_1} + \frac{\partial S_2}{\partial N_2} \frac{\partial N_2}{\partial N_1} = \frac{\partial S_1}{\partial N_1} - \frac{\partial S_2}{\partial N_2} = 0. \quad (3.30)$$

Из соотношения (3.23) следует, что

$$dS = \frac{dE}{T} + \frac{p}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN.$$

Отсюда следует соотношение

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = -\frac{\mu}{T}. \quad (3.31)$$

Условие равновесия при наличии обмена частицами подсистемы с окружением следует из (3.30) и (3.31):

$$\frac{\mu_1}{T_1} = \frac{\mu_2}{T_2}.$$

В условиях теплового равновесия $T_1 = T_2 = T$, поэтому

$$\mu_1 = \mu_2. \quad (3.32)$$

С другой стороны, функция Лагранжа для данной задачи имеет вид $L = S + \alpha N$. Условие максимума этой функции дает

$$\left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = -\alpha,$$

поэтому множитель Лагранжа α равен μ/T . Подставляя найденные выражения для множителей Лагранжа в формулу (3.13), получаем распределение Ферми–Дирака

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp[(E_i - \mu)/k_B T] + 1}. \quad (3.33)$$

3.6. БОЗОНЫ. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БОЗЕ–ЭЙНШТЕЙНА

Для бозонов – *распределение Бозе–Эйнштейна*. Бозоны – частицы с целым спином, поэтому они не подчиняются принципу Паули. С точки зрения модели «ящиков и ячеек» это значит, что в любой ячейке может находиться любое количество частиц. Рассмотрим i -й ящик, в котором находится N_i частиц и есть Z_i ячеек. Легко проверить, что в таком ящике есть $Z_i - 1$ перегородка. Разложим один раз все N_i частиц по ячейкам. Чтобы получить другие размещения частиц по ячейкам, необходимо перемещать частицы из одной ячейки в другую. Эти перемещения тождественны перестановке частицы и перегородки. Поэтому общее число возможных перестановок равно $(N_i + Z_i - 1)!$. Поскольку рассматриваемые бозоны являются тождественными частицами, то $N!$ перестановок не дают новых размещений. $(Z_i - 1)!$ перестановок перегородок между собой также не дают новых размещений. Отсюда статистический вес i -го ящика равен

$$\Omega_i = \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}. \quad (3.34)$$

По аналогии с распределением фермионов по подсистемам (см. формулу (3.7)) запишем соотношение

$$\Omega = \prod_i \Omega_i = \prod_i \frac{(N_i + Z_i - 1)!}{N_i!(Z_i - 1)!}. \quad (3.35)$$

Теперь найдем наиболее вероятное распределение бозонов по подсистемам. Для этого надо найти максимум энтропии

$$\begin{aligned} S &= k_B \ln \Omega = k_B \sum_i \{ \ln(N_i + Z_i - 1)! - \ln N_i! - \ln(Z_i - 1)! \} \approx \\ &\approx \sum_i \{ (N_i + Z_i) \ln(N_i + Z_i) - N_i \ln N_i - Z_i \ln Z_i \}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Здесь опять была использована формула Стирлинга. Единицей в аргументах логарифмов пренебрегли, поскольку $N_i \gg 1$ и $Z_i \gg 1$. По-прежнему справедливы условия (3.8), поэтому максимум энтропии ищем методом множителей Лагранжа (см. (3.11)):

$$\frac{\partial L}{\partial N_i} = \ln(N_i + Z_i) - \ln N_i + \alpha - \beta E_i = 0. \quad (3.37)$$

Отсюда для наиболее вероятного распределения бозонов по энергиям получаем распределение Бозе–Эйнштейна

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp[(E_i - \mu)/k_B T] - 1}. \quad (3.38)$$

При выводе формулы (3.38) были использованы выражения для множителей Лагранжа (3.21) и (3.31). В нормальных (не вырожденных и чистых бездефектных полупроводниках) $\langle n_i \rangle \ll 1$, поэтому

$$\langle n_i \rangle \approx \exp\left(-\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right). \quad (3.39)$$

Распределение вида (3.39) называется распределением Максвелла–Больцмана.

4. КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

4.1. НОРМАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ РЕШЁТКИ

Колебания частиц кристалла (атомов, ионов, молекул) не являются независимыми. Смещение одной частицы приводит к смещению соседних частиц. Возбуждается коллективное движение в форме упругой волны, охватывающей все частицы кристалла. Такое коллективное движение N частиц кристалла около их положений равновесия может быть описано как суперпозиция колебаний независимых гармонических осцилляторов, которые называются *нормальными колебаниями* решётки. Число нормальных колебаний, которое может возникнуть в решётке, равно числу степеней свободы частиц кристалла. Число степеней свободы – это количество независимых координат, полностью определяющее положение системы или тела. Из них колебательных степеней свободы $3N - 6$. Здесь N – число частиц, образующих кристалл. Это число обычно много больше единицы, поэтому принимают, что число степеней свободы равно $3N$.

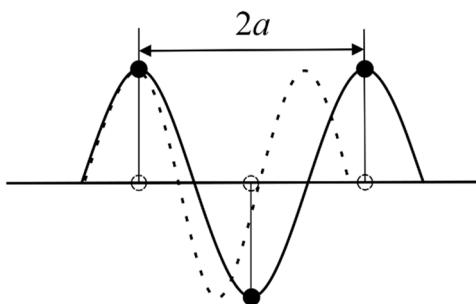


Рис. 4.1. Минимальная длина волны

Качественно можно показать, что самая короткая длина волны, которая может образоваться в одномерной цепочке, равна $2a$: $\lambda_{\min} = 2a$ (рис. 4.1). Действительно, из Рис. 4.1 следует, что меньшую длину волны (пунктирная линия) нельзя «изобразить» с помощью атомной цепочки.

4.2. ДИСПЕРСИОННЫЕ КРИВЫЕ

Волновой вектор по направлению совпадает с направлением распространения колебаний, а по модулю равен

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{v}. \quad (4.1)$$

В общем случае $v = v(k)$, поэтому получается, что $\omega = kv(k)$. Кривые, выражающие зависимость частоты от волнового вектора или длины волны, называются *дисперсионными* кривыми.

Акустические и оптические колебания

Сначала рассмотрим цепочку атомов одного сорта, имеющих массу M и расположенных на расстоянии a один от другого. Смещение из положения равновесия n -го атома запишем в виде

$$s_n = A \exp[i(kna - \omega t)]. \quad (4.2)$$

Дифференцируя это выражение два раза, получаем ускорение n -го атома:

$$d^2 s_n / dt^2 = -\omega^2 A \exp[i(kna - \omega t)] = -\omega^2 s_n. \quad (4.3)$$

По второму закону Ньютона возвращающую силу, действующую на n -й атом, можно записать в виде

$$F_n = M (d^2 s_n / dt^2) = -M \omega^2 s_n. \quad (4.4)$$

Примем, что взаимодействуют только соседние атомы. В случае малых деформаций выполняется закон Гука $F_n = -\kappa \Delta s_n$, поэтому второй закон Ньютона имеет вид

$$M \ddot{s}_m = \kappa (s_{m+1} - s_m) + \kappa (s_{m-1} - s_m). \quad (4.5)$$

Добавим сюда граничные условия Борна-Кармана:

$$s_0 = s_N. \quad (4.6)$$

Подставляя (4.3) в (4.5) получим

$$\omega^2 = (\kappa / M) [2 - (s_{n+1} / s_n) - (s_{n-1} / s_n)]. \quad (4.7)$$

После подстановки в (4.7) выражения (4.2) получим

$$\begin{aligned} \omega^2 &= (\kappa / M) [2 - \exp(ika) - \exp(-ika)] = \\ &= 2(\kappa / M) [1 - \cos(ka)] = 4(\kappa / M) \sin^2(ka / 2). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Из выражения (4.8) следует дисперсионное соотношение

$$\omega(k) = \pm 2\sqrt{\kappa / M} \sin(ka / 2) = \pm \omega_m \sin(ka / 2). \quad (4.9)$$

Знаки плюс и минус в этом выражении соответствуют бегущим в противоположные стороны волнам. Максимальная частота достигается при $\sin(ka / 2) = 1$ и равна $\omega_m = 2\sqrt{\kappa / M}$. Рассмотрим интервал значений волнового вектора $[-\pi / a, \pi / a]$. Из соотношения (4.2) следует, что волны с векторами \vec{k} , не принадлежащими этому интервалу, дублируют попавшие в него решения. Действительно, волновые векторы k' , не принадлежащие этому интервалу, можно представить в виде $k' = k + 2\pi l / a$ (здесь l – целое число). Подстановка же k' в (4.2) не дает новых решений.

Из граничных условий Борна-Кармана (4.6) получим, что

$$k = \frac{2\pi n}{aN}. \quad (4.10)$$

Отсюда найдем элемент \vec{k} -пространства (рис. 4.2), который приходится на одно состояние: $\Delta k = \frac{2\pi \Delta n}{aN}$, $\Delta n = 1$, $L = aN$ – длина цепочки. Следовательно,

$$\Delta k_1 = \frac{2\pi}{L}. \quad (4.11)$$

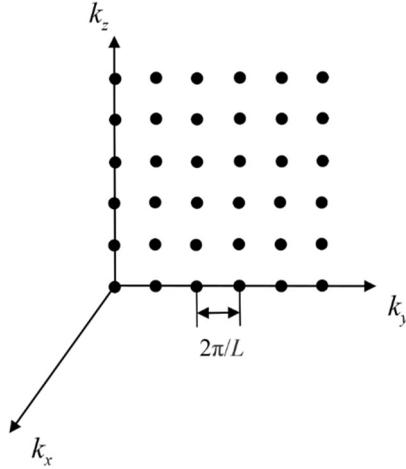


Рис. 4.2. К расчету элемента \vec{k} -пространства, приходящегося на одно состояние

Этот результат легко обобщить на двухмерный случай 2D:

$$\Delta k_1^2 = \frac{4\pi^2}{L^2}. \quad (4.12)$$

Аналогично для трехмерного случая 3D имеем:

$$\Delta k_1^3 = \frac{8\pi^3}{L^3} = \frac{8\pi^3}{V}. \quad (4.13)$$

В соответствии с соотношением (4.9) дисперсионные кривые акустических колебаний одномерной цепочки одинаковых атомов имеют вид, представленный на рис. 4.3.

Область \vec{k} -пространства, для которой $k \leq \pi/a$, образует первую зону Бриллюэна (рис. 4.3). В области больших длин волн (малых волновых векторов) синус можно заменить на его аргумент:

$$\omega(k) = \pm 2\sqrt{\kappa/M} \sin(ka/2) \approx \pm a\sqrt{\kappa/Mk} = \pm v k, \quad (4.14)$$

здесь $v = a\sqrt{\kappa/M}$. Это касательные отрезки прямых линий на рис. 4.3.

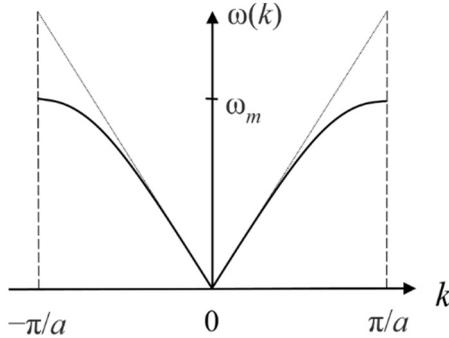


Рис. 4.3. Дисперсионные кривые акустических колебаний одномерной решетки.
 $\omega_m = 2\sqrt{\kappa/M}$ – максимальная частота колебаний

Формула (4.14) дает *дебаевское приближение* для закона дисперсии акустических колебаний. В этой области групповая скорость $v_g = d\omega/dk = v$ и фазовая скорость $v_{ph} = \omega/k = v$ равны между собой: $v_g = v_{ph} = v$. В области коротких длин волн имеем, что

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \left[\frac{\sin(ka/2)}{ka/2} \right] v \quad (4.15)$$

и

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = v \cos(ka/2). \quad (4.16)$$

Оценим максимальную частоту акустических колебаний $\nu_m = \omega_m / (2\pi)$. В соответствии с формулой (4.14) имеем, что

$$\nu_m = v k_m / (2\pi) = v / (2a). \quad (4.17)$$

Для оценки примем, что скорость звука v в твердом теле приблизительно равна 5000 м/с, межатомное расстояние $a \sim 4 \cdot 10^{-10}$ м, тогда $\nu_m \sim 10^{13}$ Гц. Эта частота соответствует инфракрасной области спектра. Отсюда следует, что волны с большими частотами не возбуждают колебания решетки. Вся практически важная часть спектра колебаний

$0 < \nu < 10^9$ Гц лежит в непосредственной близости от начала координат на рис. 4.3, где справедливо приближение Дебая. Ограниченность спектра колебаний решетки сказывается на тепловых свойствах твердых тел только в области высоких температур.

Рассмотрим цепочку атомов, состоящих из атомов двух сортов или из двух подрешеток (рис. 4.4). Тяжелого, массы M , и легкого, массы m . В этом случае возможны два типа колебаний: акустические и оптические. Последние происходят относительно центра масс базиса решетки.

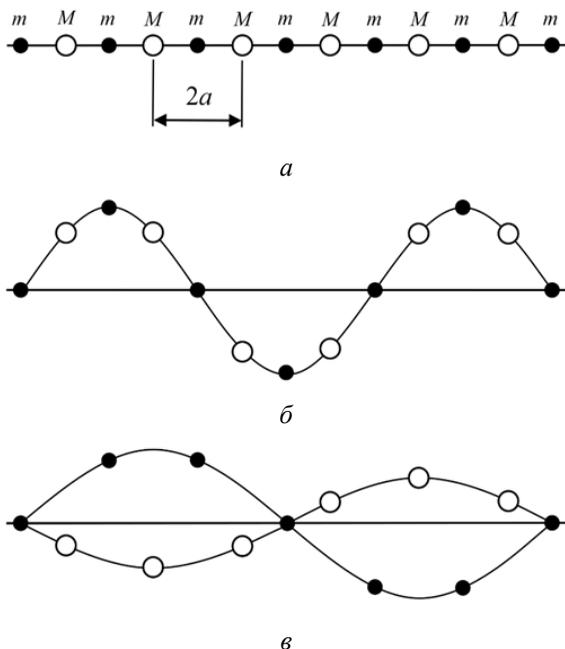


Рис. 4.4. Колебания одномерной цепочки атомов, состоящей из атомов двух сортов (а): б) акустические колебания; в) оптические колебания

Пусть M – это масса более тяжелого атома, а m – масса легкого атома. Примем, что четные атомы имеют массу m , а нечетные массу M . Будем считать, что концы атомной цепочки закреплены. Для двух типов атомов система (4.5) примет вид

$$\begin{aligned}
 m\ddot{s}_{2n} &= 2\kappa \left(\frac{s_{2n+1} + s_{2n-1}}{2} - s_{2n} \right), \\
 M\ddot{s}_{2n-1} &= 2\kappa \left(\frac{s_{2n} + s_{2n-2}}{2} - s_{2n-1} \right).
 \end{aligned}
 \tag{4.18}$$

Поскольку в колебаниях решетки участвуют оба вида атомов, то частоты их колебаний должны быть одинаковы. Ищем решение системы (4.18) в виде

$$\begin{aligned}
 s_{2n} &= A \sin(\omega t + ka \cdot 2n), \\
 s_{2n-1} &= B \sin(\omega t + ka(2n-1)).
 \end{aligned}
 \tag{4.19}$$

Подстановка (4.19) в (4.18) дает

$$\begin{aligned}
 -\omega^2 mA &= 2\kappa(B \cos ka - A), \\
 -\omega^2 MB &= 2\kappa(A \cos ka - B).
 \end{aligned}
 \tag{4.20}$$

Система (4.20) имеет отличные от нуля решения только в том случае, если

$$\begin{vmatrix}
 \kappa - \omega^2 m/2 & -\kappa \cos ka \\
 -\kappa \cos ka & \kappa - \omega^2 M/2
 \end{vmatrix} = 0.
 \tag{4.21}$$

Из (4.21) непосредственно следует, что

$$\omega^2 = \kappa \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \kappa \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{mM}}.
 \tag{4.22}$$

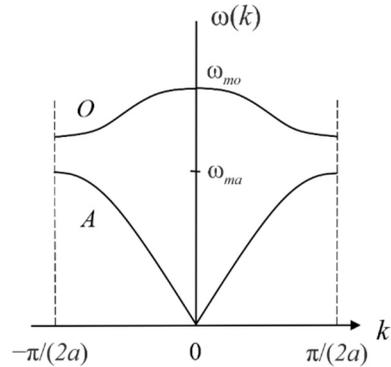
Из (4.22) получаем, что при малых значениях k для акустических и оптических колебаний справедливы соотношения

$$\omega = 2\pi a \sqrt{\frac{2\kappa}{m+M}} \cdot k \quad \text{и} \quad \omega = \sqrt{2\kappa \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)},
 \tag{4.23}$$

соответственно. Подстановка выражений (4.23) в (4.20) дает

$$A = B \quad \text{и} \quad \frac{A}{B} = -\frac{M}{m},
 \tag{4.24}$$

Рис. 4.5. Дисперсионные кривые акустических (A) и оптических (O) колебаний одномерной решетки. $\omega_{ma} = \sqrt{2\kappa / M}$ – максимальная частота акустических колебаний; $\omega_{mo} = \sqrt{2\kappa m M / (m + M)}$ – максимальная частота оптических колебаний



соответственно. При возрастании k энергетический разрыв между акустической и оптической ветвью уменьшается, но не исчезает полностью. При максимальном значении волнового вектора $k_m = \pi / (2a)$ соответствующие частоты равны

$$\omega = \sqrt{\frac{2\kappa}{M}} \quad \text{и} \quad \omega = \sqrt{\frac{2\kappa}{m}} . \quad (4.25)$$

4.3. СПЕКТР НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ РЕШЕТКИ

Объем сферы в \vec{k} – пространстве радиусом k равен

$$V_k = \frac{4}{3} \pi k^3 . \quad (4.26)$$

После деления на (4.13) имеем количество нормальных колебаний в этом объеме:

$$z = \frac{k^3 V}{6\pi^2} . \quad (4.27)$$

Учтем, что в дебаевском приближении (см. (4.14))

$$k = \frac{\omega}{v} , \quad (4.28)$$

Подставляя (4.28) в (4.27), получим

$$z = \frac{\omega^3 V}{6\pi^2 \nu^3}. \quad (4.29)$$

Функция распределения нормальных колебаний по частотам: $g(\omega)$

Дифференцируя уравнение (4.29), получим количество нормальных колебаний в шаровом слое:

$$dz = g(\omega)d\omega = \frac{3\omega^2 V}{2\pi^2 \nu^3} d\omega. \quad (4.30)$$

Здесь учтены две поперечные и одна продольная поляризация звуковых волн:

$$\frac{3}{\nu^3} = \frac{2}{\nu_{\perp}^3} + \frac{1}{\nu_{\parallel}^3}. \quad (4.31)$$

Формула (4.30) выражает число нормальных колебаний в интервале частот от ω до $\omega + d\omega$ и дает *плотность заполнения участка $d\omega$ нормальными колебаниями*.

Температура Дебая

Общее число нормальных колебаний равно $3N$, поэтому

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N.$$

Здесь ω_D – максимальная частота, которая называется *характеристической дебаевской частотой*. Соответственно, *характеристической температурой Дебая* называется величина

$$\Theta = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}. \quad (4.32)$$

Интегрируя, получаем $\frac{V\omega_D^3}{2\pi^2\nu^3} = 3N$, отсюда

$$\omega_D = \nu \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}. \quad (4.33)$$

Высокие и низкие температуры

При температуре Дебая возбуждаются все нормальные колебания, поэтому температуры принято называть высокими, если $T > \Theta$, и наоборот, низкими, если $T \ll \Theta$. После очевидных преобразований из формулы (4.30) имеем:

$$g(\omega) = 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}. \quad (4.34)$$

4.4. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР (ОБЩИЕ СВОЙСТВА). ФОНОНЫ

Гармонический осциллятор совершает гармонические колебания около положения равновесия. Потенциальная энергия имеет вид:

$$U(x) = \frac{\kappa x^2}{2}. \quad (4.35)$$

Здесь κ – константа квазиупругой силы, ω – собственная частота колебаний гармонического осциллятора. Стационарное уравнение Шрёдингера для одномерного гармонического осциллятора имеет вид:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{\kappa x^2}{2} \right) \varphi = 0. \quad (4.36)$$

Свойства решения уравнения (4.36), имеющие значение для нормальных колебаний:

1. Дискретный энергетический спектр (рис. 4.5).

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.37)$$

Минимальная энергия квантового гармонического осциллятора равна $E_0 = \hbar\omega/2$ и называется энергией нулевых колебаний.

2. Энергия нормального колебания решетки равна энергии осциллятора, имеющего массу, равную массе колеблющихся атомов, и колеблющегося с частотой, равной частоте нормального колебания.

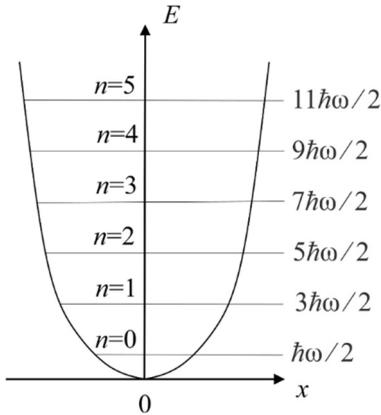


Рис. 4.6. Энергетический спектр квантового гармонического осциллятора. Разрешены только дискретные уровни энергии с шагом $\hbar\omega$, где ω – частота осциллятора

Суммируя все энергии нормальных колебаний E_i (осцилляторов с частотой ω_i), получим полную энергию тепловых колебаний кристалла:

$$E = \sum_{i=1}^{3N} E_i . \quad (4.38)$$

Каждый осциллятор представляет одно из нормальных колебаний решетки, в котором участвуют все атомы кристалла, совершая его с одной и той же частотой ω_i . Минимальная порция энергии, которую может испустить или поглотить решётка, равна

$$\varepsilon_{ph} = \hbar\omega_i . \quad (4.39)$$

Эту порцию, или квант энергии, тепловых колебаний решётки называют *фононом*.

Сравнение фононов с фотонами

Аналогия между фононами и фотонами: поле упругих волн, заполняющих кристалл, можно трактовать как фононный газ, квазичастицы которого (фононы) обладают энергией и импульсом:

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \frac{\omega}{c} \vec{n}, \quad \varepsilon_{ph} = \hbar\omega, \quad \vec{p}_{ph} = \hbar\vec{q} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \frac{\omega}{v} \vec{n}. \quad (4.40)$$

Здесь v – скорость звука. Одно из основных отличий фонона от фотона состоит в том, что фонон является квазичастицей, т. е. не может существовать вне кристаллической решетки.

Распределение фононов по энергии

Распределение фононов по энергии описывается той же функцией распределения Бозе-Эйнштейна, что и распределение фотонов по энергии:

$$f(\varepsilon_{ph}) = \frac{1}{e^{\varepsilon_{ph}/k_B T} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}. \quad (4.41)$$

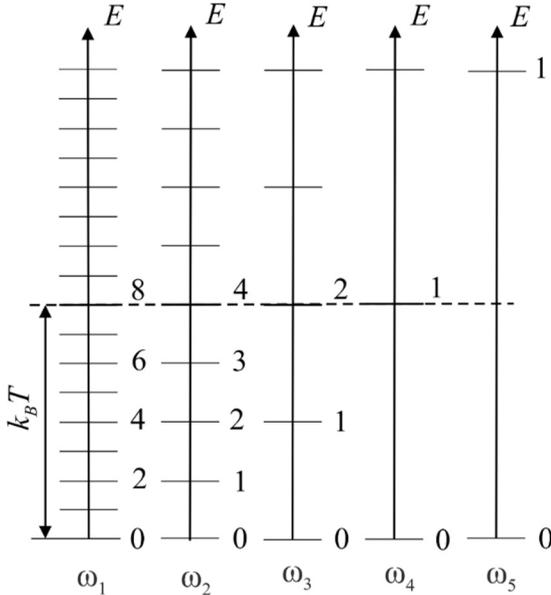


Рис. 4.7. Последовательность возбуждения нормальных колебаний при повышении температуры $T \ll \Theta$: возбуждаются только те нормальные колебания, энергия которых меньше или равна $k_B T$

При $T \ll \Theta$ возбуждаются нормальные колебания с энергией меньше или равной $k_B T$. В приведенном на рис. 4.7 примере возбуждаются нормальные колебания с частотами $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ и ω_4 . Средняя энергия нормального колебания равна

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}. \quad (4.42)$$

4.5. ТЕПЛОЕМКОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ПРИ ПОСТОЯННОМ ОБЪЕМЕ

Тепловая энергия кристаллической решетки E_L складывается из энергии нормальных колебаний $\langle E \rangle$.

$$E_L = \int_0^{\omega_D} \langle E \rangle g(\omega) d\omega, \quad (4.43)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E_L}{\partial T} \right)_{V=\text{const}} \quad (4.44)$$

Рассмотрим область низких температур $\hbar\omega_D \gg k_B T$. Поскольку возбуждены колебания с частотами $\hbar\omega < k_B T$, то

$$\langle E \rangle = \hbar\omega (e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^{-1} \approx \hbar\omega \left(1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \dots - 1 \right)^{-1} \approx k_B T. \quad (4.45)$$

$$z = \int_0^{k_B T/\hbar} g(\omega) d\omega \sim \int_0^{k_B T/\hbar} \omega^2 d\omega \sim T^3, \quad E_L \sim T^4.$$

Отсюда получаем, что

$$C_V \sim T^3. \quad (4.46)$$

Рассмотрим область высоких температур $\hbar\omega > k_B T$. При температуре Дебая возбуждаются все нормальные колебания: $z = 3N = \text{const}$, а

средняя энергия нормального колебания прямо пропорциональна температуре, то

$$E_L \sim T. \quad (4.47)$$

Из (4.44) и (4.45) непосредственно следует закон Дюлонга и Пти: $C_V = 3R = \text{const}$.

Более строгий расчет

Подставив полученные выражения в выражение для энергии решётки получим:

$$E_L = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (4.48)$$

Перейдем к безразмерной переменной $x = \hbar\omega / (k_B T)$, тогда

$$E_L = 9Nk_B \Theta \left(\frac{T}{\Theta} \right)^4 \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (4.49)$$

Опять рассмотрим область низких температур: $\Theta \gg T$. В этом случае верхний предел интегрирования можно заменить на бесконечность. Хорошо известно соотношение

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}. \quad (4.50)$$

Поэтому

$$E_L = \frac{3\pi^4}{5} Nk_B \Theta \left(\frac{T}{\Theta} \right)^4, \quad (4.51)$$

и

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta} \right)^3. \quad (4.52)$$

Область высоких температур

Для таких температур x мало, поэтому в разложении $e^x = 1 + x + x^2/2 + \dots$ можно ограничиться первыми двумя членами. После подстановки в (4.49) имеем:

$$E_L = 9Nk_B\Theta \left(\frac{T}{\Theta}\right)^4 \int_0^{\Theta/T} x^2 dx = 3Nk_B T \quad (4.53)$$

Отсюда для теплоемкости кристалла следует закон Дюлонга и Пти:

$$C_V = \left(\frac{\partial E_L}{\partial T}\right)_V = 3Nk_B = \text{const} \quad (4.54)$$

Для моля вещества $N = N_A$. Поскольку $R = N_A k_B$, то

$$C_V = 3R \approx 25 \text{ Дж} \cdot \text{моль} / \text{К}. \quad (4.55)$$

4.6. ТЕПЛОЕМКОСТЬ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Общая теплоемкость твердого тела складывается из теплоемкости решетки C_L и теплоемкости электронного газа C_e :

$$C_V = C_L + C_e. \quad (4.56)$$

Энергия и теплоемкость одного моля невырожденного электронного газа равны

$$E_e = \frac{3}{2} RT, \quad (4.57)$$

$$C_e = \frac{3}{2} R. \quad (4.58)$$

Подставляя (4.55) и (4.58) в (4.56), имеем, что теплоемкость должна быть равна $C_V = 3R + 1,5R = 4,5R \approx 37 \text{ Дж} / (\text{моль} \cdot \text{К})$. Однако эксперимент показал, что для диэлектриков и металлов $C_V = 25 \text{ Дж} / (\text{моль} \cdot \text{К})$. Различие обусловлено тем, что электроны в металлах образуют вырожденный электронный газ.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Показать, что в дебаевском приближении теплоемкость одномерной решетки из одинаковых атомов пропорциональна T/Θ при низких температурах ($T \ll \Theta$).

Распределение Ферми–Дирака (3.33) для свободных электронов имеет вид:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\exp[(E - E_F)/(kT)] + 1}. \quad (4.59)$$

При абсолютном нуле температуры (сплошная линия на Рис. 4.8) имеем, что

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= 1, & T = 0, & E < E_F; \\ \langle n \rangle &= 0, & T = 0, & E > E_F; \\ \langle n \rangle &= 0.5, & T = 0, & E = E_F. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Энергия Ферми E_F системы невзаимодействующих фермионов численно равна увеличению энергии основного состояния системы при добавлении одной частицы, что эквивалентно химическому потенциалу системы в ее основном состоянии при абсолютном нуле температур. Энергия Ферми может также интерпретироваться как максимальная энергия фермиона в основном состоянии при абсолютном нуле температур. Физический смысл *уровня Ферми*: вероятность попадания частицы на уровень Ферми составляет 0,5 при любых температурах. Название дано в честь итальянского физика Энрико Ферми.

Температура Ферми

Температура Ферми определяется как

$$T_F = \frac{E_F(0)}{k_B}, \quad (4.61)$$

$T_F \approx 60000$ К для металлов.

Электронная составляющая теплоемкости металлов обусловлена той частью электронов, которая вовлечена в тепловое движение.

Относительная доля электронов, обуславливающая теплоемкость, как следует из рис. 4.8, равна:

$$\frac{k_B T}{E_F(0)} = \frac{T}{T_F}, \quad (4.62)$$

Здесь T_F определено соотношением (4.61). Отсюда теплоемкость электронного газа равна

$$C_e = C_{cl} \frac{T}{T_F}. \quad (4.63)$$

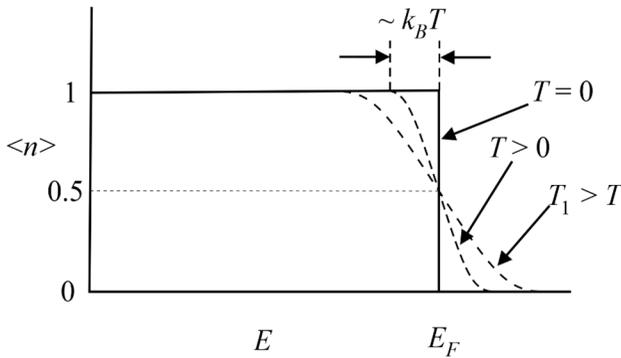


Рис. 4.8. Распределение Ферми-Дирака для электронов при различных температурах: с увеличением температуры край распределения становится все более пологим

При комнатной температуре $C_e / C_{cl} \approx 0,01$, где $C_{cl} = 3R$. Однако вблизи абсолютного нуля теплоемкость электронного газа преобладает над решеточной теплоемкостью.

$$C_e \propto T; C_L \propto T^3; C_e > C_L; T \approx 0 \text{ К.} \quad (4.64)$$

Качественно вид зависимостей (4.64) в области низких температур ($T/\Theta \ll 1$) приведен на рис. 4.9. Следует отметить, что уже в области низких температур вклады от обеих теплоемкостей становятся сравнимы по величине и начинает преобладать решеточная теплоемкость.

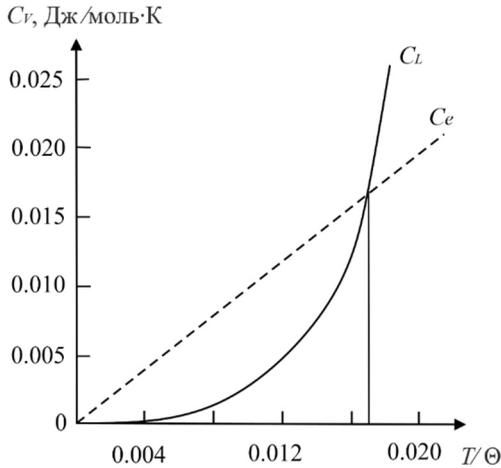


Рис. 4.9. Качественный вид зависимости C_L и C_e от приведенной температуры T/Θ

4.7. ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Реальная кривая потенциальной энергии взаимодействия атомов $U(x)$ асимметрична. Асимметрия в первом приближении может быть описана поправкой, пропорциональной x^3 :

$$U(x) = \frac{\kappa x^2}{2} - \frac{\beta x^3}{3}. \quad (4.65)$$

Отсюда следует, что сила взаимодействия атомов равна

$$F = -\frac{\partial U}{\partial x} = -\kappa x + \beta x^2. \quad (4.66)$$

Полагая среднее значение силы в положении равновесия равным нулю, получим

$$\langle F \rangle = -\kappa \langle x \rangle + \beta \langle x^2 \rangle = 0, \quad \langle x \rangle = \frac{\beta \langle x^2 \rangle}{\kappa}. \quad (4.67)$$

С точностью до членов второго порядка малости имеем, что

$$\langle U \rangle = \frac{\kappa \langle x^2 \rangle}{2}, \quad (4.68)$$

Отсюда следует, что

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2 \langle U \rangle}{\kappa}. \quad (4.69)$$

По теореме вириала полная механическая энергия равна

$$E = \langle E_k \rangle + \langle U \rangle = 2 \langle U \rangle. \quad (4.70)$$

Подставляя (4.70) и (4.71) в (4.67), имеем

$$\langle x \rangle = \frac{\beta E}{\kappa^2}. \quad (4.71)$$

Поделив (4.71) на межатомное расстояние r_0 , получим относительное линейное расширение

$$\frac{\langle x \rangle}{r_0} = \frac{\beta E}{\kappa^2 r_0}. \quad (4.72)$$

Коэффициент линейного расширения. Формула Грюнайзена

Коэффициент линейного расширения:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{r_0 + \langle x \rangle} \frac{d(r_0 + \langle x \rangle)}{dT} \approx \\ &\approx \frac{1}{r_0} \frac{d(r_0 + \langle x \rangle)}{dT} = \frac{\beta}{r_0 \kappa^2} \frac{dE}{dT} = \chi c_V. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Здесь $\chi = \beta / (r_0 \kappa^2)$, c_V – теплоемкость, приходящаяся на один атом.

В области высоких температур $E = k_B T$, поэтому $c_V = k_B$:

$$\alpha = \frac{\beta k_B}{r_0 \kappa^2}. \quad (4.74)$$

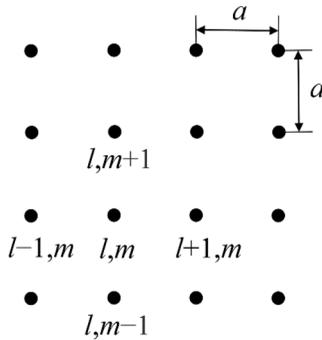
В области низких температур $c_V \sim T^3$. Формула для α была впервые получена Грюнайзеном и имела вид

$$\alpha = \frac{\gamma\eta}{3\Omega} c_V. \quad (4.75)$$

Здесь γ – постоянная Грюнайзена ($\gamma = 1.5 - 2.5$); η – коэффициент сжимаемости; Ω – атомный объем.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

1. Рассмотрим поперечные колебания плоской квадратной решетки, состоящей из рядов и столбцов одинаковых атомов. Обозначим через u_{lm} смещение атома, находящегося на пересечении l -го столбца и m -го ряда, перпендикулярное к плоскости решетки (рис.). Масса каждого атома равна M , а C – силовая постоянная для атомов, являющихся ближайшими соседями.



а) показать, что уравнением движения является

$$M \frac{d^2 u_{lm}}{dt^2} = C \left[(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{lm}) + (u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{lm}) \right];$$

б) принять, что решение имеет вид

$$u_{lm} = u(0) \exp \left[i \left(lk_x a + mk_y a - \omega t \right) \right],$$

где a – расстояние между атомами, являющимися ближайшими соседями. Показать, что уравнение движения удовлетворяется, если справедливо соотношение

$$M\omega^2 = 2C(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)).$$

2. Показать, что при абсолютном нуле температуры кинетическая энергия электронного газа в трехмерном случае равна

$$E_k = 3/5 N \varepsilon_F,$$

где N – количество электронов в системе.

5. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

5.1. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ (ПСИ-ФУНКЦИЯ)

В квантовой механике состояние микрочастицы описывается волновой функцией Ψ . Квадрат модуля волновой функции равен плотности вероятности P обнаружить частицу в данный момент времени в данной точке пространства:

$$\frac{dP}{dV} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t). \quad (5.1)$$

Условие нормировки показывает, что вероятность обнаружить частицу в объеме V , где она находится, равна единице:

$$\int_V \Psi^* \Psi dV = 1. \quad (5.2)$$

Физический смысл волновой функции заключается в следующем. Вероятность dP обнаружить частицу в окрестности точки с координатами x, y, z в объеме dV в данный момент времени равна

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi^* \Psi dV. \quad (5.3)$$

Уравнение Шрёдингера позволяет получить волновую функцию. Это уравнение постулируется на основе следующих качественных рассуждений. Рассмотрим для простоты одномерный случай. Согласно де Бройлю свободной частице можно сопоставить волну

$$\Psi = A \exp[-i(\omega t - kx)], \quad (5.4)$$

или

$$\Psi = A \exp[i(px - Et)/\hbar]. \quad (5.5)$$

Продифференцируем обе части уравнения (4.5) один раз по t и дважды по x . Получим

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 p^2 \Psi.$$

Теперь выразим E и p^2 :

$$E = \frac{1}{\Psi} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (5.6)$$

$$p^2 = -\frac{1}{\Psi} \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (5.7)$$

В нерелятивистской механике

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (5.8)$$

здесь E , p и m – энергия, импульс и масса частицы соответственно.

Подставляя (5.6) и (5.7) в (5.8), получаем *временное уравнение Шрёдингера для свободной частицы*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (5.9)$$

5.2. ВРЕМЕННОЕ И СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА ПРИ НАЛИЧИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Из механики известно, что

$$\frac{p^2}{2m} = E - U. \quad (5.10)$$

Используя соотношения (5.7), (5.9) и (5.10) теперь легко получить соотношение

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi. \quad (5.11)$$

Операторное представление уравнения Шрёдингера

Оператор Лапласа – *лапласиан*:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (5.12)$$

Оператор Гамильтона – *гамильтониан*:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U. \quad (5.13)$$

Если функция U не зависит от времени, то она имеет смысл потенциальной энергии, и решение уравнения (5.11) принимает вид:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \exp\left[-i\left(\frac{E}{\hbar}t\right)\right]. \quad (5.14)$$

После подстановки (5.14) в (5.11) получим стационарное уравнение Шрёдингера

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0. \quad (5.15)$$

Стандартные условия

1. В соответствии с физическим смыслом пси-функции она должна быть однозначной, непрерывной и конечной (за исключением, может быть, особых точек).

2. Кроме того, она должна иметь непрерывную и конечную производную (за исключением, может быть, особых точек).

5.3. БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКАЯ ОДНОМЕРНАЯ ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА

Потенциальная энергия для этой задачи имеет вид, представленный на рис. 5.1. При этом справедливы соотношения: $U(0) = U(l) = \infty$, $U = 0$ на отрезке $0 < x < l$.

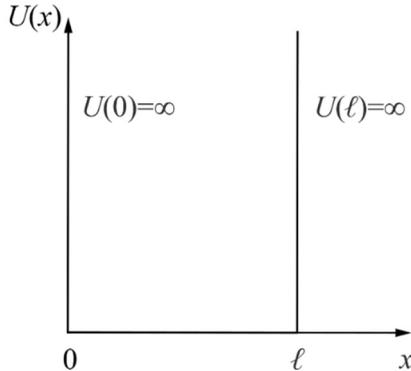


Рис. 5.1. Бесконечно глубокая одномерная потенциальная яма ширины l

За пределы потенциальной ямы частица проникнуть не может, поэтому

$$\psi(0) = \psi(l) = 0. \quad (5.16)$$

Поскольку в потенциальной яме $U=0$, то уравнение (5.15) принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0. \quad (5.17)$$

Введем обозначение

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (5.18)$$

В этих обозначениях уравнение Шрёдингера (5.17) имеет вид

$$\psi'' + k^2\psi = 0. \quad (5.19)$$

Решение уравнения (5.19) имеет аналогию в механике. Действительно, замена k и x на ω и t даёт уравнение, описывающее колебания гармонического осциллятора:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad (5.20)$$

здесь ω – частота гармонического осциллятора, x – его смещение от положения равновесия. Отсюда следует, что общее решение уравнения (5.19) можно записать в виде

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha), \quad (5.21)$$

здесь a , α – константы. Из первого граничного условия (4.16) имеем

$$\psi(0) = A \sin \alpha = 0. \quad (5.22)$$

Поэтому $\alpha = 0$. Из второго граничного условия (4.16) следует, что решение должно удовлетворять условию

$$\psi(l) = A \sin(kl) = 0. \quad (5.23)$$

Из этого соотношения получаем:

$$kl = \pm \pi n \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (5.24)$$

Значение $n = 0$ отбрасывается, т. к. в этом случае $\psi = 0$ во всем пространстве.

Энергия частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме

Подставив после несложных преобразований соотношение (5.24) в (5.18), получим для энергии частицы выражение

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (5.25)$$

Как следует из соотношения (5.25) энергетические уровни энергии частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме не эквидистантны (рис. 5.2). С увеличением квантового числа n расстояние между уровнями энергии растет.

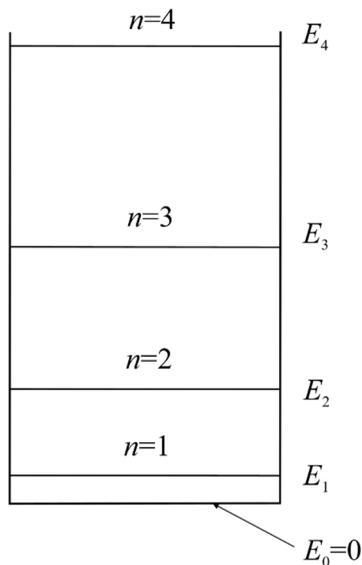


Рис. 5.2 Энергетические уровни энергии частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме

Классический предел ($n \gg 1$)

Найдем разность двух соседних уровней энергии ΔE_n :

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{ml^2} n. \quad (5.26)$$

Относительное изменение расстояния между соседними уровнями энергии равно:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2}{n}. \quad (5.27)$$

В классическом пределе $n \rightarrow \infty$, поэтому справедливо соотношение

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Delta E_n}{E_n} = 0.$$

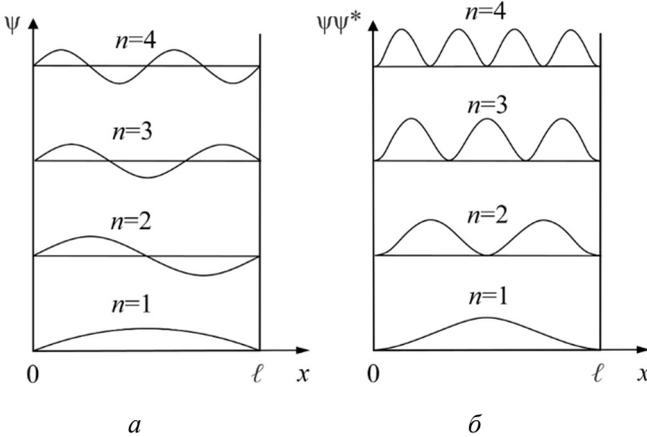


Рис. 5.3. Зависимость волновой функции (а) и плотности вероятности обнаружить частицу (б) от координаты x внутри бесконечно глубокой одномерной потенциальной ямы ширины l

5.4. СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ. ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Задача на собственные значения и собственные функции:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (5.28)$$

Значения E , удовлетворяющие уравнению (5.28), называются собственными значениями (энергии). Решения, соответствующие собственным значениям E , называются собственными функциями задачи. Совокупность собственных значений величины называется ее *спектром*. Если эта совокупность образует дискретную последовательность, спектр называется *дискретным*. Если собственные значения образуют

непрерывную последовательность, спектр называется непрерывным или сплошным. В случае дискретного спектра собственные значения и собственные функции могут быть пронумерованы:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$$

$$E_1, E_2, \dots, E_n, \dots,$$

$$\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$$

Условие ортогональности имеет вид:

$$\int_V \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm}. \quad (5.29)$$

Здесь δ_{nm} – символ Кронекера. Символ Кронекера по определению может принимать следующие значения:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}. \quad (5.30)$$

Найдем ортонормированные собственные функции частицы, находящейся в бесконечно глубокой потенциальной яме. Собственные функции имеют вид:

$$\Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right), \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (5.31)$$

Константа A определяется из условия нормировки:

$$A^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dx = 1, \Rightarrow A^2 = \frac{1}{\int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dx} = \frac{2}{l}.$$

Отсюда находим, что $A = \sqrt{2/l}$. Легко проверить, что полученные собственные функции

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right), \quad (5.32)$$

Ортогональны, т. е.

$$\int_0^l \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \int_0^l \frac{2}{l} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) \sin\left(\frac{\pi m}{l} x\right) dx = \delta_{nm}. \quad (5.33)$$

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Пусть частица находится в потенциальном ящике в виде куба со стороной L . Используя граничное условие $\psi = 0$ на поверхности куба, найти все волновые функции для первых трех уровней энергии.

5.5. ПРИНЦИП СУПЕРПОЗИЦИИ И СРЕДНЕЕ ЗНАЧЕНИЕ ФИЗИЧЕСКОЙ ВЕЛИЧИНЫ

Пусть некоторая квантово-механическая система может существовать как в состоянии ψ_1 , так и в состоянии ψ_2 . Тогда существует состояние системы, описываемое функцией

$$\Psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad (5.34)$$

где c_1 и c_2 – произвольные комплексные числа.

Ортонормированные собственные функции образуют базис. Любую волновую функцию Ψ можно разложить по этому базису

$$\Psi = \sum_i a_i \psi_i, \quad (5.35)$$

$$a_i = \int_V \psi_i^* \Psi dV. \quad (5.36)$$

Физический смысл коэффициента a_i

Обозначим физическую величину как q . Квадраты модулей коэффициентов a_i дают вероятности того, что при измерениях, проводимых над системой, находящейся в состоянии Ψ , будут получены соответствующие собственным функциям ψ_i собственные значения физической величины q_i . Поскольку сумма всех таких вероятностей должна быть равна единице, коэффициенты должны удовлетворять условию

$$\sum_i a_i^2 = 1. \quad (5.37)$$

Тогда ее среднее значение равно

$$\langle q \rangle = \sum_i |a_i|^2 q_i. \quad (5.38)$$

Если спектр собственных значений непрерывный, тогда

$$\langle q \rangle = \int_V \psi^* \hat{q} \psi dV. \quad (5.39)$$

5.6. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР «ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ» («СТУПЕНЬКА»)

Уравнение Шредингера для этого типа потенциального барьера имеет вид

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0, \quad x \leq 0 \quad (5.40)$$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \psi = 0, \quad x \geq 0. \quad (5.41)$$

Запишем *решение* уравнения Шредингера:

$$\psi_1(x \leq 0) = a_1 \exp(ik_1 x) + b_1 \exp(-ik_1 x), \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar,$$

$$\psi_2(x \geq 0) = a_2 \exp(ik_2 x), \quad k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar.$$

Пусть падающая волна характеризуется вещественной амплитудой a_1 . Из условия непрерывности волновой функции ψ' и ее производной в точке $x = 0$ находим соотношение между коэффициентами

$$b_1 = a_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (5.42)$$

Коэффициенты отражения и прозрачности определяются так

$$R = \left| \frac{b_1}{a_1} \right|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad \text{и} \quad D = 1 - R = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}, \quad (5.43)$$

соответственно. В качестве примера рассмотрим распределение плотности вероятности местоположения частицы $w(x)$ для случая $E = 4U_0/3$ [6], т. е. $E > U_0$.

$$w_1(x) = \psi_1^* \psi_1 = \frac{16}{9} a_1^2 \left(1 - \frac{3}{4} \sin^2(k_1 x) \right),$$

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{8mU_0}{3}}, \quad w_2(x) = \psi_2^* \psi_2 = \frac{16}{9} a_1^2.$$

Плотность вероятности вблизи «ступеньки» представлена качественно на рис. 5.4. В области I падающая и отраженная волны интерферируют, образуя стоячую волну. В области II бегущая слева направо волна дает одинаковую плотность вероятности обнаружить частицу.

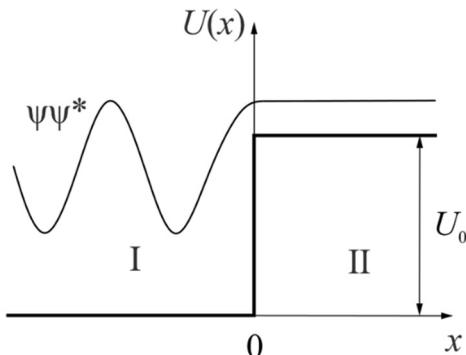


Рис. 5.4. Зависимость от координаты x плотности вероятности обнаружить частицу вблизи потенциального барьера типа «ступенька». Энергия частицы E удовлетворяет соотношению $E > U_0$

На рис. 5.5 представлен другой тип потенциального барьера и качественно изображена зависимость от координаты x плотности вероятности обнаружить частицу. Принято, что энергия частицы удовлетворяет соотношению $E < U_0$.

Несмотря на то, что энергия частицы не достаточна для преодоления потенциального барьера с точки зрения классической механики,

частица преодолевает потенциальный барьер и в области III (рис. 5.5) мы наблюдаем бегущую слева направо волну. Это чисто квантовый эффект, который называется туннельным эффектом. Есть даже вероятность обнаружить частицу прямо под потенциальным барьером (область II).

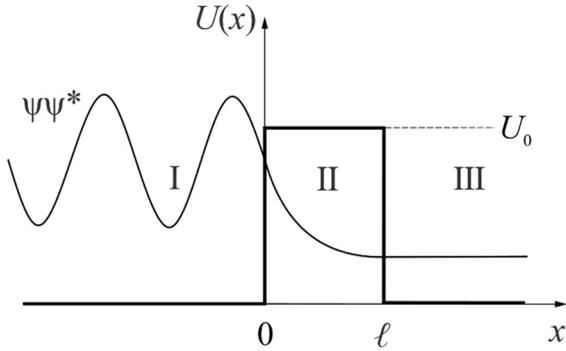


Рис. 5.5. Зависимость от координаты x плотности вероятности обнаружить частицу вблизи потенциального барьера типа «барьер». Энергия частицы E удовлетворяет соотношению $E < U_0$

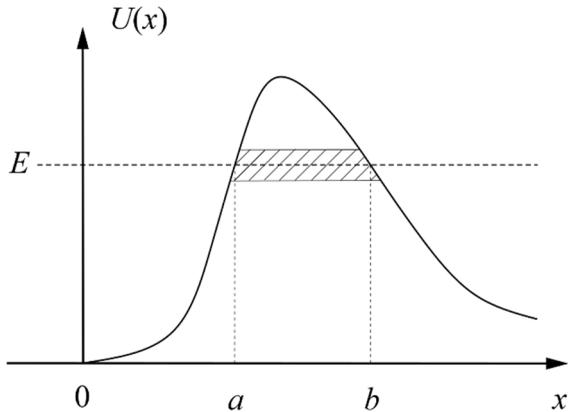


Рис. 5.6. Туннельный эффект в случае потенциального барьера произвольной формы. Заштрихованная область – воображаемый туннель, которого, конечно, нет

Туннельный эффект

Можно показать, что в случае потенциального барьера произвольной формы для коэффициента прозрачности получается формула

$$D \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right]. \quad (5.44)$$

Здесь E – энергия частицы, смысл остальных обозначений в формуле (5.44) понятен из рис. 5.6.

5.7. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Гармоническим осциллятором называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы $F_x = -kx$ (см. раздел 4.4). Потенциальная энергия такой частицы имеет вид параболы. Собственная частота классического гармонического осциллятора равна

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Уровни энергии квантового гармонического осциллятора эквидистантны (см. формулу (4.37) и рис. 4.6):

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega.$$

Потенциальную энергию можно представить в виде

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Таким образом, уравнение Шрёдингера для гармонического осциллятора имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (5.45)$$

Собственные значения энергии и собственные функции гармонического осциллятора

A_0, A_1, A_2, \dots – нормировочные коэффициенты.

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_0 = A_0 \exp(-\alpha^2 x^2 / 2), \quad \psi_1 = A_1 x \exp(-\alpha^2 x^2 / 2)$$

$$\psi_2 = A_2 (2\alpha^2 x^2 - 1) \exp(-\alpha^2 x^2 / 2), \dots \quad (5.46)$$

$$\alpha^2 = \frac{\sqrt{km}}{\hbar}.$$

Плотность вероятности обнаружить частицу, совершающую гармонические колебания, в точке с координатой x еще раз демонстрирует туннельный эффект (рис. 5.7): частица проникает сквозь барьер, т. е. есть вероятность обнаружить частицу в областях слева и справа от потенциального барьера. Казалось бы, что проникновение частицы сквозь барьер должно быть тем больше, чем больше ее энергия. Но это не происходит вследствие двух причин. Во-первых, с увеличением энергии гармонического осциллятора увеличивается его отклонение от положения равновесия x , что приводит к росту «крутизны» потенциального барьера: $U'(x) = kx$. Чем круче барьер, тем больше он похож на потенциальный барьер с бесконечно высокими стенками и тем меньше глубина проникновения осциллятора. Во-вторых, большим энергиям E_n соответствуют большие квантовые числа n (см. (4.37)). С ростом этого квантового числа гармонический осциллятор становится все более классическим (см. (5.27) и рядом), а классическая (т. е. подчиняющаяся законам классической механики) частица не может пройти сквозь потенциальный барьер.

ЗАДАЧА ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

Показать, что собственные функции (5.46) ортогональны. Найти их нормировочные коэффициенты. Убедиться, что ψ_1 является решением уравнения (5.45).

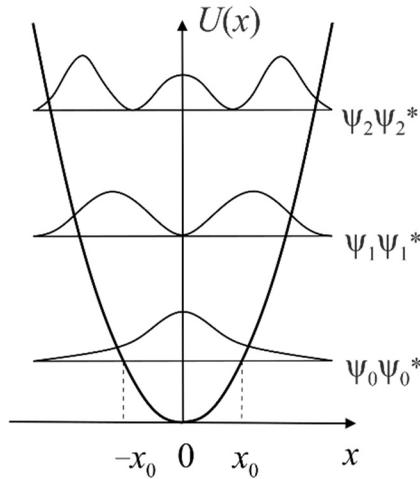


Рис. 5.7. Зависимость плотности вероятности обнаружить колеблющуюся частицу от координаты x в случае гармонического осциллятора

Как следует из соотношения (4.37) наименьшее возможное значение энергии гармонического осциллятора равно (см. рис. 4.6)

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (5.47)$$

Это значение называется нулевой энергией гармонического осциллятора. Квантовая механика позволяет вычислить вероятности различных переходов квантовой системы из одного состояния в другое. Эти дополнительные условия называются правилами отбора. Для гармонического осциллятора правило отбора имеет вид

$$\Delta n = \pm 1. \quad (5.48)$$

Это значит, что переходы разрешены только между соседними уровнями. Правило отбора (5.48) справедливо только для чисто гармонических колебаний. Если в колебаниях осциллятора есть ангармоническая составляющая, то возможны переходы между любыми уровнями энергии.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Дикарева Р.П.* Введение в кристаллофизику. Избранные вопросы. – Новосибирск, 2006. – 238 с.
2. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 791.
3. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. Том 1. – М.: Мир, 1979. – 458.
4. L. Nacker Müller et al. 2003, Phys. Rev. Lett. 91 090408.
5. *Савельев И.В.* Курс общей физики. В 5 томах. Том 5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – Санкт-Петербург: Лань, 2011. – 440.
6. *Иродов И.Е.* Задачи по квантовой физике. – М.: Бином, 2015. – 220 с.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. – Т. III. Квантовая механика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 800 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Кристаллические решетки и структуры	3
1.1. Классификация кристаллических структур по их характерному размеру	3
1.2. Радиальная функция распределения	5
1.3. Радиальная парная корреляционная функция $g(r)$	6
1.4. Решетка Браве	7
1.5. Решетка Браве для двумерных кристаллов	10
1.6. Кристаллическая структура химических соединений	11
1.7. Ячейка Вигнера–Зейтца	14
1.8. Индексы Миллера	15
Задача для самопроверки	17
2. Дифракция потоков частиц и рентгеновского излучения на кристаллах	18
2.1. Волны де Бройля. Формула де Бройля	18
2.2. Дифракция электронов и молекул	19
Задача для самопроверки	21
2.3. Дифракция рентгеновских лучей	22
2.4. Интенсивность рассеяния рентгеновского излучения и частиц на кристаллах	25
2.5. Расчет амплитуды рассеяния решеткой Браве	28
2.6. (Геометрический) структурный фактор и обратная решетка	29
2.7. Зона Бриллюэна	32

2.8. Расчет структурного фактора базиса. Законы погасания для различных типов структур	34
2.9. Атомный фактор рассеяния (форм-фактор атома).....	35
Задача для самопроверки	36
Задача для самопроверки	37
3. Распределение фермионов и бозонов по энергиям	38
3.1. Микроскопическое описание состояния термодинамической системы	38
3.2. Макроскопическое описание состояния термодинамической системы. Статистический вес.....	39
3.3. Фермионы	40
3.4. Второе начало термодинамики. Температура	42
3.5. Системы с переменным числом частиц	44
3.6. Бозоны. Распределение Бозе–Эйнштейна.....	46
4. Колебания кристаллической решетки.....	48
4.1. Нормальные колебания решётки	48
4.2. Дисперсионные кривые	49
4.3. Спектр нормальных колебаний решетки	55
4.4. Квантовый гармонический осциллятор (общие свойства). Фононы.....	57
4.5. Теплоемкость кристаллической решетки при постоянном объеме.....	60
4.6. Теплоемкость электронного газа	62
Задача для самопроверки	63
4.7. Тепловое расширение твердых тел	65
Задача для самопроверки	67
5. Уравнение Шрёдингера	69
5.1. Волновая функция (пси-функция).....	69
5.2. Временное и стационарные уравнения Шрёдингера при наличии взаимодействия	71
5.3. Бесконечно глубокая одномерная потенциальная яма	72
5.4. Собственные значения и собственные функции. Ортогональность собственных функций	75
Задача для самопроверки	77

5.5. Принцип суперпозиции и среднее значение физической величины	77
5.6. Прохождение частиц через потенциальный барьер «Туннельный эффект» («ступенька»)	78
5.7. Гармонический осциллятор	81
Задача для самопроверки	82
Библиографический список	84

Чернышев Альфред Петрович

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ТВЕРДОГО ТЕЛА И НАНОФИЗИКУ

СПЕЦИАЛЬНЫЙ КУРС ФИЗИКИ. КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

Учебное пособие

В авторской редакции

Выпускающий редактор *И.П. Брованова*
Дизайн обложки *А.В. Ладыжская*
Компьютерная верстка *Л.А. Веселовская*

Налоговая льгота – Общероссийский классификатор продукции
Издание соответствует коду 95 3000 ОК 005-93 (ОКП)

Подписано в печать 05.12.2019. Формат 60 × 84 1/16. Бумага офсетная. Тираж 50 экз.
Уч.-изд. л. 5,11. Печ. л. 5,5. Изд. № 291. Заказ № 64. Цена договорная

Отпечатано в типографии
Новосибирского государственного технического университета
630073, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20