

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫНЫҢ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Ш. ЕСЕНОВ АТЫНДАҒЫ КАСПИЙ МЕМЛЕКЕТТІК ТЕХНОЛОГИЯЛАР ЖӘНЕ
ИНЖИНИРИНГ УНИВЕРСИТЕТІ**

ПЕДАГОГИКАЛЫҚ ТЕХНОЛОГИЯЛАР ИНСТИТУТЫ

ФИЗИКА ЖӘНЕ ИНФОРМАТИКА КАФЕДРАСЫ

ТӘЖІҒҰЛОВ Б.Т., БИЖАНОВА Қ.

ЗАТТЫҢ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ТЕОРИЯСЫ
(«050110 Физика» мамандығы студенттеріне
арналған оқу-әдістемелік құрал)

Ақтау, 2010

ӨӘЖ-539.1075

Пікір жазғандар: П.Ғ.Д профессор А.Қ.Ахметов
Ф.м.ғ.к,доценті Б.М.Дүсенбаев

С Заттың электрондық теориясы: Оқу-әдістемелік құрал. – Ақтау: Ш. Есенов атындағы КМТиИУ, 2010.

Бұл әдістемелік құралда қысқаша заттарды электронды теориясы пәнінен әдістемелік құрал қысқаша дәрістер жинақталған. Әдістемелік құрал көлемінде заттардың электрондық теориясынан негізгі мәселелері қаралған. Бұл құрал 050110-физика мамандығында оқитын студенттерге арналған.

Ш. Есенов атындағы Каспий мемлекеттік технологиялар және инжиниринг университеті Оқу-әдістемелік кеңесінің шешімімен баспаға ұсынылды.

© Ш. Есенов ат. КМТЖИУ, 2010 ж.

АЛҒЫ СӨЗ

Қазіргі кезде қатты денелер физикасы теориясы кең жылдам дамыған ғылым. Оның ішінде электрондық теория өте кең және көлемді дамып келеді. Сондықтанда көлемі аз ғана қысқа курста оны түсіндіру өте қиын. Сондықтанда заңдылықты теориялық ұғымды фундаменталды тәжірибелерді немесе көптеген көзқарастардың қорытындысын дәл түсіндіру қиын. Бұл еңбектің бірінші тарауында қатты денелердің зоналық теориясы кристалдық торлар металдар және жартылай өткізгіштер диэлектриктер теориясын қысқаша баяндаумен шектелген. Кристалдық тор динамикасы қатты денелердің жоғарғы және төменгі температураларындағы жылу сыйымдылығын қараумен шектелген. Ал металдардағы электрондық газ металдар өткізгіштігінің кванттық теориясын қараумен шектелген.

Бұл еңбекте негізінен студенттердің жалпы және теориялық физикадан алған біліміне сүйенеді.

Авторлар КМТЖИУ профессоры А.К. Ахметовке және доцент Б. Дуйсембаевқа, доцент А.Түркменбаевқа алғыс білдіреді.

1. ҚАТТЫ ДЕНЕЛЕРДІҢ ЗОНАЛЫҚ ТЕОРИЯСЫ

1.1 Қатты денелердегі атомдардың байланысу түрлері

Зат қатты, сұйық, газтәріздес және плазмалық күйде болады.

Қатты күйдегі зат кристалдық немесе аморфтық түрде болады. Кристалл түріндегі қатты денелер кеңістіктік реттеле орналасқан иондар, атом немесе молекулалардан тұрады. Аморфтық қатты денелерде бөлшектер кеңістікте тәртіппен орналаспайды. Бірақ көршілес бөлшектердің байланысымен сипатталатын белгілі бір реттелу болуы мүмкін.

Байланыс түрлеріне қарай кристалдар иондық, коваленттік, металдық, молекулалық және сутектік байланыстағы кристалдар болып топталады.

Иондық кристалдар кезектесіп орналасқан оң және теріс иондардан тұрады. Олар бір элемент атомдарындағы электрондардың басқа элемент атомына ауысу нәтижесінде түзіледі. Мұндай иондар мысалы, сілтілі элементтердің галогендермен өзара байланысы кезінде түзіледі. Иондық кристалдардағы байланыс негізінен әр аттас зарядтардың электростатикалық тартылысын негізделген. Иондық кристалдарға сәуленің инфрақызыл аумағындағы күшті жұтылу, төменгі температураларда аз электрлік өткізгіштік және жоғары температураларда жоғары иондық өткізгіштік қасиеттер тән.

Коваленттік кристалдарда байланыс қарама-қарсы спиндік проекциясы бар валенттік электрондар жұбынан түзіледі. Бұнда валенттік электрондары белгілі бір иондарда қармалған иондық кристалдарға қарағанда коваленттік электрондардың иондар аралығындағы тығыздығы жоғары болады. Коваленттік байланысқа *s*- және *p*- күйлердің қабаттасуына (гибридизация) негізделген кеңістіктік бағытталу тән. *2s*-күйдегі екі валенттік электроны және *2p*-күйіндегі екі валенттік электроны бар көміртегі атомы тетраэдр төбелерінде орналасқан көрші атомдармен төрт электрондық жұп құрайды (көміртектік байланыс). Коваленттік кристалдардың мысалы алмаз болып табылады. Коваленттік кристалдарға жоғары қаттылық, төменгі температураларда шамалы электр өткізгіштік тән.

Кейбір кристалдарда байланыс иондық пен коваленттік арасында болады. Мысалы: InSb қосылысының кристалдарында электрондар тығыздығы индийға (In) қарағанда сурьмада (Sb) артық. Ал күкіртті мырышта (ZnS) валенттік электрондар негізінен күкірт атомдарында топтасқан.

Металдық кристалдардағы байланыс периодты түрде орналасқан оң иондар мен кристалдың барлық көлемінде еркін қозғалатын топтасқан валенттік электрондардың өзара әсерлесуінен түзіледі. Металдарда барлық көршілермен екі электрондық коваленттік байланыс түзуге қажетті атомның валенттік электрондарының саны жеткіліксіз. Мысалы: литий (Li) кристалында әрбір атомның сегіз жақын көршісі бар. Ал бұлардың барлығымен екі электрондық байланыс түзу үшін литий атомының бір емес, сегіз валенттік электроны болуы керек. Сонымен металдық кристалдарда (иондық және коваленттік кристалдардан өзгешелегі) валенттік электрондардың азғана мөлшері көптеген оң иондарды байланыстырады. Металдарға жоғары электр өткізгіштік, жақсы жылу өткізгіштік және жоғарғы пластикалық қасиеттері тән.

Молекулалық кристалдардағы байланыс Ван-дер-Ваальстың тартылыс күштерімен жүзеге асады. Бұл күштердің табиғаты кванттық механикада қарастырылады. Молекулааралық Ван-дер-Ваальс күштері химиялық күштердің әлсізі (молекулалық кристалдардың байланыс энергиясы бір молекулаға 0,1 эВ шамасында), бірақ олар біршама алыс қашықтықтардан әсер етеді. Молекулалық кристалдарда тор түйіндерінде бейтарап молекулалар орналасады. Молекулалық кристалдарды қатты күйге өткен сутегі, хлор, көміртегінің екі оксиді, сонымен бірге көптеген органикалық заттар түзейді. Инертті атомдардың түзетін кристалдары да молекулалыққа жатады, себебі олардағы байланыс молекулалық кристалдардағы сипатқа ие болады. Молекулалық кристалдардың балку температурасы төмен және сығылғыштығы жоғары. Бұл Ван-дер-Ваальс күшіне тән әлсіз байланысқа негізделген.

Сутектік байланыс Ван-дер-Ваальс байланысынан күштірек, бірақ коваленттік байланысқа қарағанда әлсіздеу. Ол сутегі электроны бір атоммен, ал қалған протон басқа атоммен байланыс түзейтіндігінен туындайды. Нәтижесінде сутегі атомы, сутегі электроны тек бір коваленттік байланысқа қатыса алатындығына қарамастан, екі атоммен байланысқа түседі.

Сутектік байланыс сутегі және F, O, N, C, Cl, S электрлік теріс элементтерден тұратын жүйелерде түзіледі. Сутектік байланыс органикалық кристалдарда, ақуыздарда, тірі ағзаларда көрініс табады.

1.2 Кристалл торының геометриясы

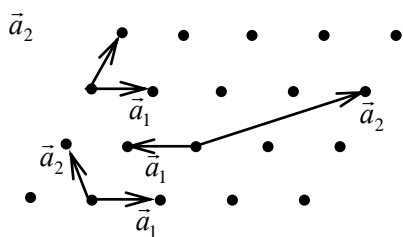
Кеңістіктік тор. Кристалл құрылымы кеңістіктік тормен сипатталады, оның түйіндері мынадай векторлармен анықталады.

$$\vec{l} = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3, \quad (1.2.1)$$

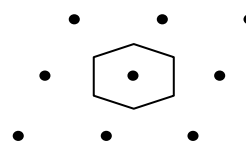
мұндағы: l_1, l_2, l_3 - бүтін сандар, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ - негізгі кеңістіктік периодтардың векторлары. $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ векторларынан түзілген көпжақты элементар ұяшық деп аталады. Кристалл элементар ұяшықтардың кеңістіктік қайталануымен тұрғызылуы мүмкін.

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ векторларын және, демек, элементар ұяшықты таңдау бірмәнді болып табылмайды. 1-суретте базистік векторларды таңдау әдістері көрсетілген.

Ұяшықты ол орталық-симметриялық (Вигнер-Зейтц ұяшығы) болатындай тұрғызуға болады. Ол үшін тор түйінін көрші түйіндермен қосатын түзулерді тең бөлікке бөлу қажет (2-сурет).



1-сурет



2-сурет

Элементтер ұяшықта бір немесе бірнеше атом орналасуы мүмкін. Егер ұяшықта бір атом орналасса, онда тор түйінін осы атоммен біріктіруге болады. Бұл жағдайда тор Бравэ торы немесе қарапайым тор деп аталады. Егер ұяшықта бірнеше атом орналасса, онда торды бір-біріне енгізілген бірнеше қарапайым торлар түрінде көруге болады. Онда тор $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ векторларымен және \vec{A} базистік векторлармен сипатталады. \vec{A} базистік векторлар $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ векторлары бар торға қатысты қосымша қарапайым торлардың ығысуымен анықталады.

Кристалдық жүйе. Кристалдық тор (1.2.1) түріндегі тор векторларымен анықталатын трансляция (параллель көшу) кезінде өзі-өзімен беттеседі. Сонымен бірге тор белгілі бір осі маңында бұрылу және қандай да бір жазықтықтарды айналық шағылу кезінде өзі-өзімен беттесе алады.

Кристалдық тордың мүмкін симметрия осьтері 2, 3, 4- және 6-ші реттік. Шынында да тор қандай да ось маңында $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ (мұндағы n -ось реті) бұрышқа бұрылғанда өз-өзімен беттеседі. Мұндай бұрылу кезіндегі қарастырылып отырған оське перпендикуляр тордың ең қысқа векторы \vec{a} модулі бойынша a -ға тең тордың \vec{a}_1 векторына ауысады (3-сурет). Ал кері бағыттағы $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ бұрышқа бұрылу a векторын \vec{a}_2 тор векторына ауыстырады. Ол да модулі бойынша a -ға тең. $\vec{a}_1 + \vec{a}_2$ қосындысы a векторына араллель және тордық қандай да бір түйінін анықтайды. Сондықтан

$$\vec{a}_1 + \vec{a}_2 = \alpha \vec{a}, \quad (1.2.2)$$

мұндағы: α -бүтін сан. 3-суреттен көрініп тұрғандай

$$|\vec{a}_1 + \vec{a}_2| = 2a \cos \varphi = 2a \cos \frac{2\pi}{n}. \quad (1.2.3)$$

(1.2.2) және (1.2.3) өрнектерден аламыз:

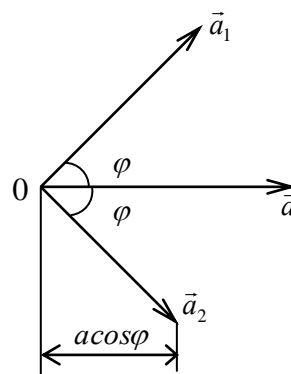
$$\alpha = 2 \cos \frac{2\pi}{n}. \quad (1.2.4)$$

$|\cos \frac{2\pi}{n}| \leq 1$ болғандықтан, (1.2.4)-тен $|\alpha| \leq 2$ екені шығады.

Сондықтан α бүтін сан тек 0, ± 1 , ± 2 мәндерін қабылдай алады. $\alpha = -2, -1, 0, 1$ мәндерін қоя отырып, (1.2.4) өрнектен

$n = 2, 3, 4, 6$ екенін аламыз. Олай болса, бұрылу кезінде кристалдарда мүмкін болатын симметриялық түрленулер C_2, C_3, C_4 және C_6 (мұндағы C_n -симметрия осі маңындағы $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ бұрышқа бұрылу операциясы).

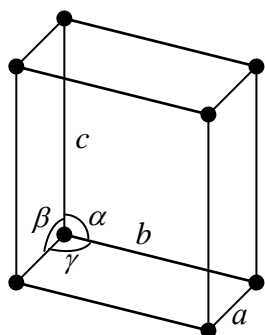
Кристалда тек қана жеті нүктелік симметриялық түрлену жүзеге асады. Олар 1) инверсиясы бар, 2) 5-ші, 7-ші не одан жоғары ретті осьтер болмайды, 3) 3-ші, 4-ші немесе 6-шы ретті симметрия осьтері арқылы өтетін симметрия жазықтығы бар. Сондықтан да тек қана жеті кристаллографиялық жүйе (сингония) жүзеге асады:



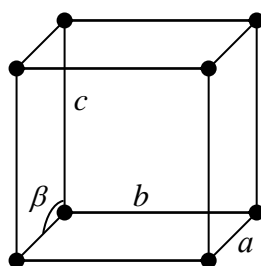
3-сурет

1. Триклиндік жүйе: элементар ұяшықтың түйіндері қабырғаларының ұзындықтары $a \neq b \neq c$ және олардың арасындағы бұрыштар $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ болатын параллелепипедтің төбелерінде орналасқан (4-сурет). Жүйе тек инверсия (I) түрленуіне қатысты симметриялы.

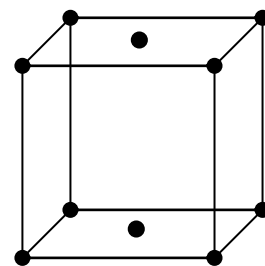
2. Моноклиндік жүйе: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$. Жүйе түзу параллелепипед симметриясына ие (симметриялық түрлену C_{2h} -симметрия осі 2-ші реттік және оған симметрия жазықтығы перпендикуляр). Қарапайым моноклиндік торда түйіндер параллелепипед төбесінде орналасқан (5 а-сурет). Центренген базисті моноклиндік торда түйіндер сонымен бірге қарама-қарсы тікбұрышты жақтардың центрлерінде орналасқан (5 б-сурет)



4-сурет



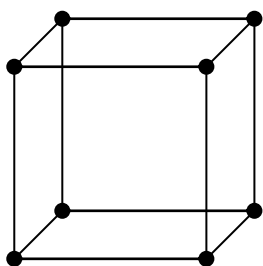
а



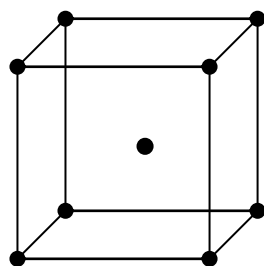
б

5-сурет

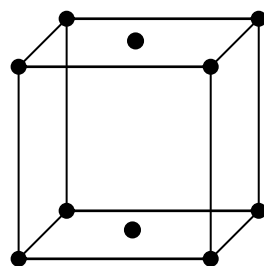
3. Ромбтық жүйе: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Жүйе тікбұрышты параллелепипедтің симметриясына ие. Ромбтық жүйеге (6-сурет) қарапайым тормен (а) қатар көлемдік центрленген (б), жақтық центрленген (в) торлар және центрленген базисті тор (г) жатады.



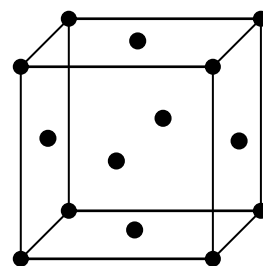
а



б



в

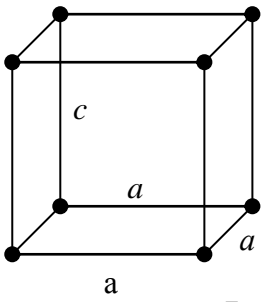


г

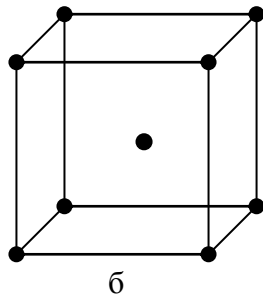
6-сурет

4. Тетрагоналдық жүйе: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Бұл жүйе квадраттық негіздегі тік призманың симметриясына ие. Тетрагоналдық жүйе құрамына (7-сурет) қарапайым (а) және көлемдік центрленген (б) торлар енеді.

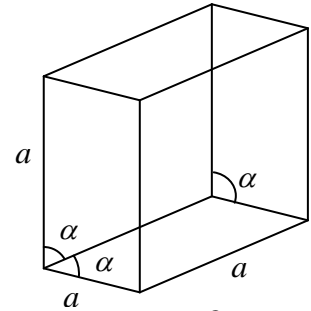
5. Ромбоэдрлік (тригоналдық) жүйе: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$. Жүйе ромбоэдр симметриясына ие. Бұл жүйедегі мүмкін ұяшық 8-суретте көрсетілген.



7-сурет



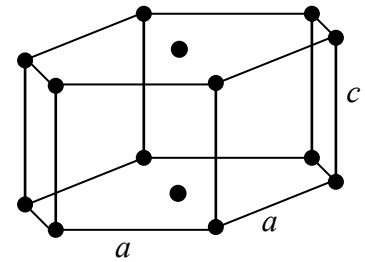
б



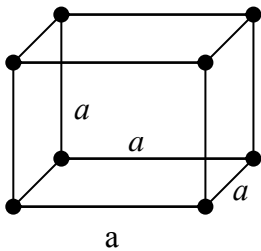
8-сурет

6. Гексогоналдык жүйе. $a=b \neq c$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$. Жүйеге дұрыс алтыжақты призманың симметриясы тән. Осы жүйенің ұяшығы 9-суретте көрсетілген.

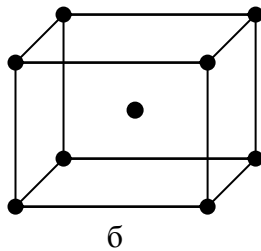
7. Кубтык жүйе: $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$. Жүйеге кубтык симметрия тән. Кубтык жүйеге (10-сурет) қарапайым (а), көлемдік центрленген (б) және жақтык центрленген (в) ұяшықтар жатады.



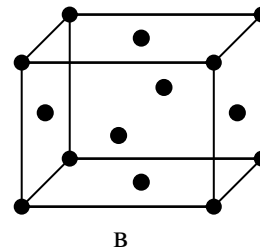
9-сурет



а



б



в

10-сурет

1.3 Кристалдык тордың периодтык өрісіндегі электронның қозғалысы

Кристалл торындағы электрондар қозғалысы Шредингер теңдеуімен өрнектеледі.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}), \quad (1.3.1)$$

мұндағы: ψ – толқындық функция, E – энергия, m – электрон массасы, V – потенциалдық энергия, оның кристалл торындағы периоды

$$V(\vec{r} + \vec{l}) = V(\vec{r}). \quad (1.3.2)$$

Ал еркін электрон жағдайында, $V=0$ болғанда (1.3.1) өрнегі былай жазылады

$$\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (1.3.3)$$

мұндағы: \vec{k} – толқындық вектор, A – амплитуда. Бұл кезде еркін электронның энергиясы келесі түрде өрнектеледі:

$$E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}, \quad (1.3.4)$$

мұндағы: $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ - импульс, \hbar – Планк тұрақтысы.

Егер V r -ға тәуелді болса, $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ импульс операторы (1.3.1) өрнегіндегі гамильтонианмен байланыспады және электронның импульсі сақталмайды. Ол жағдайда:

$$\psi(\vec{r}) = \int_{\vec{k}} c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k}, \quad (1.3.5)$$

мұндағы: $c(\vec{k})$ - жазық толқындар бойынша (1.3.1) теңдеуі шешімінің жіктеу коэффициенттері.

(1.3.1)-ші тор потенциалының периодтылық шарты кристалл өрісінде қозғалған электронның толқындық функциясының белгілі бір қасиеттеріне және энергетикалық спектріне әкеледі. Тор потенциалын Фурье қатарына жіктейік

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{r}}, \quad (1.3.6)$$

мұндағы: $V_{\vec{g}}$ - жіктеу коэффициенті. (1.3.6) және (1.3.2) өрнектерден шығатыны

$$\sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{i\vec{g}(\vec{r}+\vec{l})} = \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{r}}. \quad (1.3.7)$$

Бұл өрнек қанағаттандырылады, егер барлық \vec{l} үшін төмендегі шарт орындалса

$$e^{i\vec{g}\vec{l}} = 1 \quad (1.3.8)$$

(1.3.5) және (1.3.6)-дан ψ және $V(\vec{r})$ мәндерін (1.3.1)-ге қойсақ, мынаны аламыз

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\vec{k}} k^2 c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k} + \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\vec{r}} \int_{\vec{k}} c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k} = E \int_{\vec{k}} c(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d\vec{k}. \quad (1.3.9)$$

Мұнда $\nabla^2 e^{i\vec{k}\vec{r}} = -k^2 e^{i\vec{k}\vec{r}}$ екені ескерілген. (1.3.9)-ды $e^{-i\vec{k}_1\vec{r}}$ -ға көбейтеміз және \vec{r} бойынша интегралдап, мынаны аламыз

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\vec{k}} k^2 c(\vec{k}) \int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} d\vec{r} d\vec{k} + \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} \int_{\vec{k}} c(\vec{k}) \int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}+\vec{g}-\vec{k}_1)\vec{r}} d\vec{r} d\vec{k} = E \int_{\vec{k}} c(\vec{k}) \int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} d\vec{r} d\vec{k}. \quad (1.3.10)$$

$$\int_{\vec{r}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} d\vec{r} = 8\pi^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}_1) \quad (1.3.11)$$

өрнегін (мұндағы δ - дельта функция) ескеріп, (1.3.10) - өрнектен мынаны аламыз

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) c(\vec{k}_1) + \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} c(\vec{k}_1 - \vec{g}) = 0, \quad (1.3.12)$$

немесе \vec{k}_1 - ды \vec{k} -ға ауыстырамыз, сонда

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)c(\vec{k}) + \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} c(\vec{k} - \vec{g}) = 0. \quad (1.3.13)$$

(1.3.13) өрнектен E және k -ның берілген мәндерінде $c(\vec{k})$ коэффициенті тек қана $c(\vec{k}')$ коэффициенттерімен байланысты. Сондықтан (1.3.5) интегралы мынадай қосынды түрінде болады.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} c(\vec{k} + \vec{g}) e^{i(\vec{k} + \vec{g}) \cdot \vec{r}}. \quad (1.3.14)$$

Бұл (1.3.14)-өрнектің коэффициенттері (1.3.13)-ке сәйкес біртекті сызықты алгебралық теңдеулер жүйесін қанағаттандырады

$$\left[\frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{g})^2}{2m} - E \right] c(\vec{k} + \vec{g}) + \sum_{\vec{g}_1} V_{\vec{g}_1} c(\vec{k} + \vec{g} - \vec{g}_1) = 0 \quad (1.3.15)$$

Бұл жүйенің шешімі нөлден өзгеше болады, егер D анықтағышы нөлге өзгеше тең болса

$$D(E, \vec{r}) = 0 \quad (1.3.16)$$

(1.3.16) теңдеуіндегі E_1, E_2, \dots, E_n түбірлер \vec{k} толқындық векторға тәуелді. Сондықтан энергетикалық спектрлер $E_1(\vec{k}), E_2(\vec{k}), \dots, E_n(\vec{k})$ аймақтарынан тұрады. Әрбір мұндай аймақ **энергетикалық зона** деп аталады. Сонымен кристалдың периодты өрісінде қозғалған электронның энергетикалық спектрінің **зоналық құрылымы** болады.

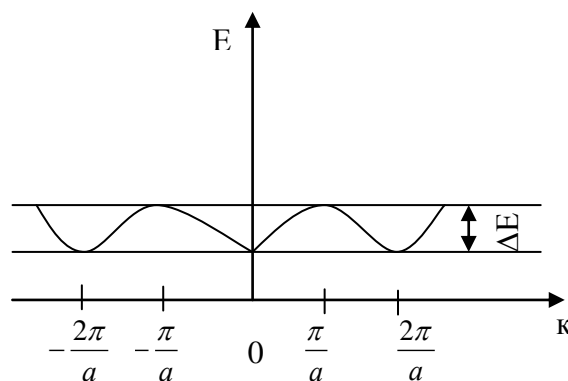
Әрбір зонадағы энергия \vec{k} -ның периодтық функциясы болып табылады. Сондықтан, \vec{k} -ны $(\vec{k} - \vec{g})$ -ға ауыстыру (1.3.15)-тен тек жазылу ретімен өзгеше.

Мұнда $E_n(\vec{k})$ түбірлері өзгермей қалады.

Демек

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} - \vec{g}) \quad (1.3.17)$$

Ал E_n -нің \vec{k} -дан периодтық тәуелділігі бір өлшемді жағдай үшін 11-суретте көрсетілген.



11-сурет

1.4 Блохтың толқындық функциясы және квазиимпульс

(1.3.14)-ші толқындық функцияны былай жазуға болады:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \sum_{\vec{g}} c(\vec{k} + \vec{g}) e^{i\vec{g}\vec{r}}. \quad (1.4.1)$$

Төмендегі белгілеуді енгізіп

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} c(\vec{k} + \vec{g}) e^{i\vec{g}\vec{r}}, \quad (1.4.2)$$

(1.4.1)-ден мынаны аламыз

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.4.3)$$

Ал $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ функциясы периодтылық шартын қанағаттандырады

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{l}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (1.4.4)$$

Шындығында (1.4.2) өрнегінен шығатыны

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{l}) = \sum_{\vec{g}} c(\vec{k} + \vec{g}) e^{i\vec{g}(\vec{r} + \vec{l})}. \quad (1.4.5)$$

Онда $e^{i\vec{k}\vec{r}} = 1$ екенін ескеріп (1.4.5) -тен мынаны аламыз

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{l}) = \sum_{\vec{g}} c(\vec{k} + \vec{g}) e^{i\vec{g}\vec{r}} \quad (1.4.6)$$

бұл (1.4.2) бойынша (1.4.4)-пен сәйкес келеді.

Сонымен (1.4.3) түріндегі толқындық функциялар (мұндағы $u_{\vec{k}}$ (1.4.4)-тегі периодтылық шартын қанағаттандырады). **Блох функциялары** деп аталады. Олар еркін электронның қозғалысын сипаттайтын (1.3.3) жазық толқындарынан $u_{\vec{k}}$ көбейткішімен өзгеше. Ал (1.4.3) өрнектен мынаны аламыз

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{l}) = e^{i\vec{k}(\vec{r} + \vec{l})} u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{l}). \quad (1.4.7)$$

(1.4.4)-ті ескеріп, былай жазуға болады.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{l}) = e^{i\vec{k}\vec{l}} e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (1.4.8)$$

(1.4.7) және (1.4.3) өрнектерінен кристалл торының периодты өрісінде қозғалған электронның толқындық функциялары Блохтың шартын қанағаттандыратыны шығады

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{l}) = e^{i\vec{k}\vec{l}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.4.9)$$

Ал еркін электрон жағдайында:

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = e^{\frac{i\vec{p}\vec{a}}{\hbar}} \psi(\vec{r}), \quad (1.4.10)$$

мұндағы: \vec{a} - еркін ығысу, \vec{p} - импульс операторы. Сондықтан да (1.4.10)-ға ұқсас $\hbar\vec{k}$ векторы квазиимпульс деп аталады. Квазиимпульстің мағынасы, (1.4.9)-дан көрініп тұрғандай, ол тор векторын көшіргендегі толқындық функцияның түрленуін анықтайды.

Импульс пен квазиимпульстің арасында көп айырмашылық бар. Кристалдың периодты өрісінде электронның импульсі сақталмайды. Керісінше (1.4.3) өрнегіне сәйкес кристалдағы электронның толқындық функциясы толқындық вектордың белгілі мәнімен және $\hbar\vec{k}$ квазиимпульспен сипатталады.

1.5 Атомдық энергетикалық деңгейлердің бөлінуі және энергетикалық аймақтардың құрылуы

Көптеген металдарда өткізгіштікке жартылай қатысатын және сол мезетте кристалл торы түйіндеріндегі иондармен күшті байланысатын электрондар кездеседі. Ондай электрондар үшін еркіндеу электрондардың жуықтауы жеткіліксіз болып табылады. Мұндай жағдайда ең тиімді жуықтауды күшті байланыс әдісі береді.

Күшті байланыс әдісінде кристалдың периодты өрісіндегі электронның толқындық функциясы төмендегідей қосынды түрінде беріледі

$$\psi_{kn}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{l}} e^{i\vec{k}\vec{l}} \psi_n(\vec{r} - \vec{l}), \quad (1.5.1)$$

мұндағы: N - тор түйіндерінің саны, $\psi_n(\vec{r} - \vec{l})$ - атомның n -ші күйіндегі күшті орныққан электронның толқындық функциясы. Оның центрі кристалдық тордың түйінінде болады да, \vec{l} векторымен анықталады.

(1.5.1) теңдеуіндегі функция (1.4.9) Блох шартын қанағаттандырады. Шындығында (1.5.1) өрнегіне сәйкес

$$\psi_{kn}(\vec{r} + \vec{l}_1) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{l}} e^{i\vec{k}\vec{l}} \psi_n(\vec{r} + \vec{l}_1 - \vec{l}). \quad (1.5.2)$$

$$\vec{h} = \vec{l} - \vec{l}_1 \quad (1.5.3)$$

белгілеуін енгіземіз. (1.5.2) және (1.5.3) өрнектерінен мынаны аламыз

$$\psi_{kn}(\vec{r} + \vec{l}_1) = e^{i\vec{k}\vec{l}_1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{h}} e^{i\vec{k}\vec{h}} \psi_n(\vec{r} - \vec{h}). \quad (1.5.4)$$

Бұл өрнектің оң жағындағы қосынды (1.5.1)-гі қосындымен сәйкес келеді. Сондықтан (1.5.4)-тен мынаны аламыз.

$$\psi_{kn}(\vec{r} + \vec{l}_1) = e^{i\vec{k}\vec{l}_1} \psi_{kn}(\vec{r}) \quad (1.5.5)$$

Бұл Блохтың (1.4.9) шартына сәйкес келеді. Ал (1.5.1) күйіндегі электрон энергиясының ауытқу теориясының бірінші жуықтауы былай анықталады

$$E_n(\vec{k}) = \int_{\vec{r}} \psi_{kn}^* \hat{H} \psi_{kn} d\vec{r} \quad (1.5.6)$$

мұндағы \hat{H} - Шредингер теңдеуіндегі гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (1.5.7)$$

(1.5.1)-гі ψ_{kn} толқындық функцияны (1.5.6)-ға қойып, мынаны аламыз

$$E_n(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{l}} \sum_{\vec{l}_1} e^{i\vec{k}(\vec{l} - \vec{l}_1)} \int_{\vec{r}} \psi_n^*(\vec{r} - \vec{l}_1) \hat{H}(\vec{p}, \vec{r}) \psi_n(\vec{r} - \vec{l}) d\vec{r}. \quad (1.5.8)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 + \vec{l} \quad (1.5.9)$$

десек, (1.5.8), (1.5.7) және (1.5.3) өрнектерінен мынаны аламыз:

$$E_n(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{l}} \sum_{\vec{h}} e^{i\vec{k}\vec{h}} \int_{\vec{r}_1} \psi_n^*(\vec{r}_1 + \vec{h}) \hat{H}(\vec{p}, \vec{r}_1 + \vec{l}) \psi_n(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \quad (1.5.10)$$

Ал (1.3.2) периодтық потенциалға сәйкес былай жазуға болады.

$$\hat{H}(\vec{p}, \vec{r}_1 + \vec{l}) = \hat{H}(\vec{p}, \vec{r}_1). \quad (1.5.11)$$

Сондықтан (1.5.10)-нан

$$E_n(\vec{k}) = \sum_{\vec{h}} e^{i\vec{k}\vec{h}} \varepsilon_n(\vec{h}), \quad (1.5.12)$$

мұндағы

$$\varepsilon_n(\vec{h}) = \int_{\vec{r}} \psi_n^*(\vec{r} + \vec{h}) \hat{H} \psi_n(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.5.13)$$

(1.5.12) теңдеуі (1.3.17) периодтылық шартын қанағаттандырады, шындығында (1.5.12)-ге сәйкес

$$E_n(\vec{k} - \vec{g}) = \sum_{\vec{h}} e^{i(\vec{k}-\vec{g})\vec{h}} \varepsilon_n(\vec{h}) = \sum_{\vec{h}} e^{i\vec{k}\vec{h}} \varepsilon_n(\vec{h}). \quad (1.5.14)$$

Сонда (1.5.14) және (1.5.12) өрнектер (1.3.17) өрнегінен шығады.

$\psi_n(\vec{r})$ атомдық функциялар күшті орныққан, сондықтан (1.5.10)-дағы $\varepsilon_n(\vec{h})$ шамалары $\psi_n(\vec{r} + \vec{h})$ және $\psi_n(\vec{r})$ толқын функциялар центрлерінің аралығында h қашқтықтың өсуімен күшті төмендейді. Сондықтан жақын көршілеріне ғана жуықтауды жүргізуге болады және (1.5.12) қосындыдағы $\varepsilon(\vec{h})$ -тың мәндерін $\vec{h}=0$ және $\vec{h} = \vec{h}_1$ үшін қалдыруға болады. Сонда (1.5.12)-ден шығатыны

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(0) + \sum_{\vec{h}_1} e^{i\vec{k}\vec{h}_1} \varepsilon_n(\vec{h}_1). \quad (1.5.15)$$

Ал қарапайым кубтық тор жағдайындағы \vec{h}_1 векторының координаттары $(a,0,0)$, $(-a,0,0)$, $(0,a,0)$, $(0,-a,0)$, $(0,0,a)$, $(0,0,-a)$, сондықтан (1.5.15)-тен мынаны аламыз.

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(0) + \varepsilon_n(a)(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a}) \quad (1.5.16)$$

немесе

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(0) + 2\varepsilon_n(a)(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (1.5.17)$$

Егер $-1 \leq \cos \alpha \leq 1$ болса, онда (1.5.17)-ден энергияның мәні энергетикалық аумақ құрайды. Оның ені

$$\Delta E = 12|\varepsilon_n(a)|. \quad (1.5.18)$$

$ka \ll 1$ болғанда, k -ның аз мәндерінде $\cos k_x a$, $\cos k_y a$ және $\cos k_z a$ -ларды $k_x a$, $k_y a$, $k_z a$ дәрежелері бойынша қатарға жіктеуге болады:

$$\cos k_x a = 1 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 + \dots \quad (1.5.19)$$

($\cos k_y a$ және $\cos k_z a$ -лар үшін осыған ұқсас).

Ал (1.5.19) және (1.5.17) өрнектерінен мынаны аламыз:

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(0) + 6\varepsilon_n(a) - \varepsilon_n(a)a^2 k^2. \quad (1.5.20)$$

Сонымен $ka \ll 1$ болғандағы зона центріне жақын маңда **дисперсия заңы параболалық** болады. (1.5.20) өрнегі тұрақтыға дейінгі дәлдікпен (1.3.4) түріне келеді

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(0) + 6\varepsilon_n(a) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.5.21)$$

мұндағы: m^* -эффектілік масса,

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2a^2 \varepsilon_n(a)}. \quad (1.5.22)$$

(1.5.20)-ға сәйкес

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = -2a^2 \varepsilon_n(a), \quad (1.5.23)$$

болса, онда (1.5.22)-ні былай жазуға болады:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (1.5.24)$$

Аумақтың центріне жақын жерде изоэнергетикалық беттер (1.5.20)-ға сәйкес сфералар болып табылады. Онда k өскенде сфералар деформацияланады және изоэнергетикалық бет зона шекарасына қарай созылады. Бұл (1.5.17)-нің туындысына сәйкес

$$\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_x} = -2a \varepsilon_n(a) \sin k_x a \quad (1.5.25)$$

(осындай туынды $\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_y}$ және $\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_z}$ үшін де алынады). Ал (1.5.25) түріндегі туынды зона шекарасында нөлге тең. Бұдан изоэнергетикалық беттердің зона шекарасымен тік бұрышпен қиылысатындығы шығады.

Зона төбесіне жақын жерде

$$k_x a = \pm \pi + q_x a, \quad q_x a \ll 1 \quad (1.5.26)$$

болғанда (мұндай теңдік $k_y a$, $k_z a$ үшін де орындалады) $\cos k_x a$, $\cos k_y a$ және $\cos k_z a$ -ларды $q_x a$, $q_y a$, $q_z a$ дәрежелері бойынша жіктеуге болады

$$\cos k_x a = -1 + \frac{1}{2}(q_x a)^2 + \dots \quad (1.5.27)$$

(1.5.27) және (1.5.17) теңдеулерден шығатыны:

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(0) - 6\varepsilon_n(a) + \varepsilon_n(a) a^2 q^2 \quad (1.5.28)$$

немесе

$$E_n(\vec{k}) = \varepsilon_n(0) - 6\varepsilon_n(a) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^{**}}, \quad (1.5.29)$$

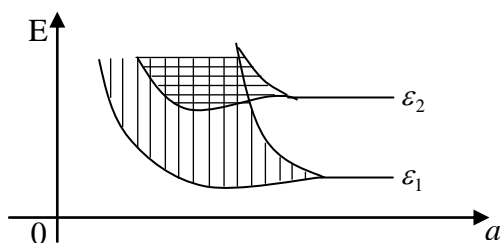
мұндағы:

$$m^{**} = \frac{\hbar^2}{2a^2 \varepsilon_n(a)} \quad (1.5.30)$$

(1.5.30) және (1.5.22) өрнектерін салыстырғанда зонаның сегіз төбесіне жақын маңда m^{**} эффектілік масса зона центріне жақын маңдағы m^* эффектілік массаға модулі бойынша тең, ал таңбасы бойынша қарама-қарсы болады. Егер $a \rightarrow \infty$ болса, онда (1.5.13)-ке сәйкес $\varepsilon_n(a) \rightarrow 0$. Ал зона ені ΔE (1.5.18)-ге сәйкес нөлге ұмтылады және (1.5.17)-ден $E_n(\vec{k})$ энергиясы $\varepsilon_n(0)$ деңгейіне ұмтылады.

Бұл кристалда энергетикалық зоналардың түзілуін түсіндіруге мүмкіндік береді.

Айталық бірдей күйдегі N атомдар бір-бірінен қашық орналассын, олардың күйлері ε_n энергетикалық деңгейлерде күшті орныққан ψ_n толқындық функциямен сипатталады. Өйткені атомдардың әрқайсысында электрон ψ_n күйде бола алады, онда ε_n деңгей *азғындалған* болып табылады. Атомдар бір-біріне жақындағанда олар бір-бірін қоздырады. Сондықтан азғындалу жоғалады



12-сурет

және атомдық деңгей энергетикалық зонаға жіктеледі (12-сурет). Бұл суреттен атомдардың жеткілікті жақындасуы кезінде түрлі атомдық деңгейлерден пайда болатын энергетикалық зоналар кеңейіп, олардың бір-бірін жабуы орын алады.

1.6 Металдар, жартылай өткізгіштер және диэлектриктер

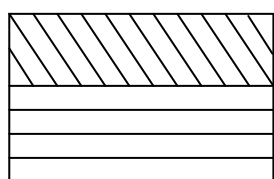
Бриллюэн зонасында N түрлі \vec{k} толқындық векторлар бар. (N - кристалдағы түйіндер саны). Толқындық векторы \vec{k} электронда спиннің екі проекциясы болуы мүмкін, демек энергетикалық зонада $2N$ күй болады. Сондықтан Паули принципі бойынша энергиялық зонада $2N$ электрон бола алады.

Толтырылған зона электр өткізгіштікке үлесін қоспайды, себебі онда бос күй жоқ, ал сыртқы электр өрісі әсерінен толу негізінен толқындық векторлардың бағытталуына көп күш салады. Толық толтырылған аумақты валенттік зона деп атайды. Егер бұл аумақтан электрондардың бір бөлігі басқа деңгейге өтсе де, осы атауы сақталады.

Егер зонада электрондар сыртқы электр өрісінің әсерінен өте алатын көп бос деңгейлер болса, оны өткізгіштік зона деп атайды.

Зоналардың өзара орналасуы және толтырылу сипаты қатты денелерді олардың өткізгіштік түрі бойынша топтастыруда маңызды орын алады.

1) Түйіндерінде бір валентті элементтің иондары (мысалы, Li, K, Na, Rb, Cs) бар кристалдарды қарастырайық. Бұнда әр атом өткізгіштік зонаға бір электрон береді, демек зона жартылай толған (13-сурет). Бұл кристалдар үшін зоналар бір сызылады. Валенттік зона түгел толмағандықтан азғана берілетін жылу энергиясы басы бос валенттік электронды жоғары энергетикалық деңгейге көшіреді. Сондықтан кристалдардағы байланыс оң зарядталған металл иондары мен коллективті электрондардың өзара байланысынан тұрады. Сол себептен мұндай кристалдар өте төмен температурада да жақсы электр өткізгіштік қасиетке ие болады және металдар болып табылады.



13-сурет

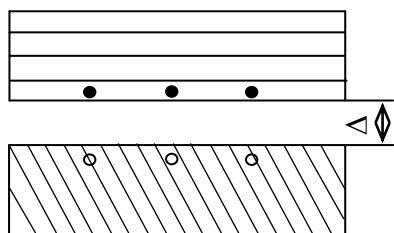
2) Егер кристалдық тор түйіндерінде екі валентті элементтер атомдары (мысалы, Be, Ca, Sr, Mn) орналасса және атомдардың әрқайсысы зонаға екі электроннан берсе, онда зонадағы электрондар саны $2N$ -ге тең болады. Мұндай жағдайда зона толық толтырылған болып табылады және мұндай кристалдарда

электр өткізгіштік қасиет болмауы керек. Бұнда өткізгіштік аумақ толық болғандықтан өткізгіштік болмайтын сияқты. Бірақ та көрсетілген екі валентті элементтерден тұратын қатты денелер металдар болып табылады. Оның себебі кристалдардың энергетикалық деңгейлері, яғни электрондармен толмаған жоғары энергетикалық деңгейлер төменгі энергетикалық деңгеймен (электрондары толған) қабаттасып жатады (12-сурет). Сондықтан толтырылған зона электрондары жоғары зонаның бос деңгейлеріне өте алады және бұл зат металл күйде болады.

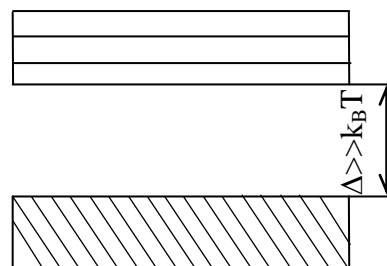
Егер де валенттік зона мен өткізгіштік зонаның арасында Δ -өткізбейтін зона пайда болса, мынандай екі түрлі қатты денелер пайда болады.

- Егер де $\Delta \ll k_B T$ (мұндағы Δ - ұлықсат етілмейтін зона ені, k_B -Больцман тұрақтысы, T -температура) болса (14-сурет), бұл жағдайда жылу энергиясының әсерімен валенттік зонадағы электрондар өткізгіштік зонаға өтеді де, мұнда ток тасымалдаушылардың екі түрі: өткізгіштік зонада теріс электрондар және валенттік зонада оң кемтіктер пайда болады. Мұндай қатты денелерді жартылай өткізгіштер деп атайды.

- Егер $\Delta \gg k_B T$ болса, онда бұл жағдайда жылу энергиясының әсерінен валенттік зонадағы электрондар өткізгіштік зонада өте алмайды (15-сурет). Мұндай кристалдар төменгі температурада (300K) ток өткізбейді, мұндай кристалдарды диэлектриктер деп атайды.



14-сурет



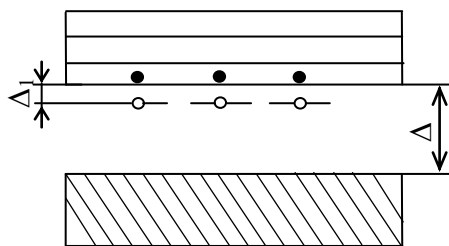
15-сурет

Егер өткізгіштік зона мен валенттік зона арасында қоспалы энергетикалық деңгейлер орналасса, кристалда пайда болған электр өткізгіштік электрондардың қоспалы деңгейден өткізгіштік зонаға өту салдарынан немесе валенттік зонадан қоспадан деңгейге өту арқылы жүзеге асырылады.

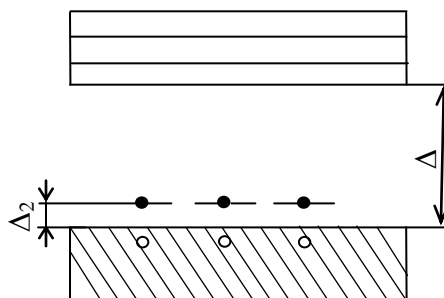
Егер электрондардың қоспалы деңгейден өткізгіштік зонаға өтуін қарастырсақ, онда 16-сурет бойынша $\Delta_1 \ll k_B T$ (Δ_1 -қоспалы деңгей мен өткізгіштік зона табаны арасындағы интервал) болса, онда жылу энергиясының әсерінен донорлық қоспадағы электрондар өткізгіштік зонаға өтеді, бұл жағдайда ток тасымалдаушылар электрон болғандықтан жартылай өткізгіштер n -типті жартылай өткізгіштер деп аталады.

Егер $\Delta_2 \ll k_B T$ (Δ_2 - валенттік зонаның жоғары деңгейі мен акцепторлық (қоспалық) деңгей арасындағы интервал) болса, жылу энергиясының әсерінен валенттік зонадағы электрондар акцепторлық деңгейге өтеді (17-сурет), яғни кристалда электр өткізгіштік пайда болады. Бұл жағдайдағы ток

тасымалдаушылар кемтіктер болғандықтан, мұндай жартылай өткізгіштер p -типті жартылай өткізгіштер деп атайды.



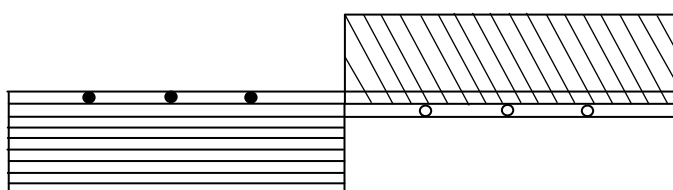
16-сурет



17-сурет

Донорлық және акцепторлық қоспалардың болуымен жалпы жағдайда аралас өткізгіштік болуы мүмкін.

Егер өткізгіштік зонаның табаны валенттік зонаның жоғары деңгейінен сәл төмен орналасса, онда зат жартылай металл болып табылады (18-сурет).



18-сурет

Ал жартылай металдарда жартылай өткізгіштерден айырмашылығы $T=0$ температурада да өткізгіштік зонадағы электрондар саны валенттік зонадағы кемтіктер санына тең. Зоналардың бір-бірін сәл ғана жабуы өткізгіштік электрондар санының металдарға қарағанда бір атомға кем болуына әкеледі (мысалы, висмутта бір өткізгіштік электрон 10^5 атомға келеді). Мұның металдардан өзгешелігі өткізгіштік зонадағы электрондар саны температураға тәуелді емес. Жартылай металдарда температура артқанда өткізгіштік зонадағы электрондардың саны мен валенттік зонадағы кемтіктер саны өседі.

Егер валенттік зона мен өткізгіштік зона бір-бірін жаппаса, бірақ валенттік зонаның жоғарғы жиегі өткізгіштік зонаның төменгі жиегімен түйісіп тұрса, онда зат саңылаусыз жартылай өткізгіш болып табылады.

2 КРИСТАЛДЫҚ ТОР ДИНАМИКАСЫ

2.1 Кристалдық тор тербелісінің классикалық теориясы

Кристалдарда атомдар (немесе иондар) тор түйіндері маңында аз тербеліс жасайды. Әрбір элементар ұяшықта массасы M бір атом орналасқан кристалды қарастырайық. Кристалл атомдарының тербеліс энергиясының теңдеуі

$$E = K + U, \quad (2.1.1)$$

мұндағы:

$$K = \frac{1}{2} M \sum_{n=1}^N \dot{\vec{r}}_n^2 \quad (2.1.2)$$

кинетикалық энергия (\vec{r}_n - тордың n -ші түйінінен атомның \vec{l}_n вектормен анықталатын орын ауыстыруы), ал

$$U = U(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N) \quad (2.1.3)$$

потенциалдық энергия. Мұндағы

$$\vec{R}_n = \vec{l}_n + \vec{r}_n, \quad (2.1.4)$$

n -ші атомның радиус-векторы. Сонда (2.1.3) және (2.1.4) өрнектерден

$$U = U(\vec{l}_1 + \vec{r}_1, \vec{l}_2 + \vec{r}_2, \dots, \vec{l}_N + \vec{r}_N). \quad (2.1.5)$$

Атомдардың тепе-теңдік күйден ауытқуы өте аз болғандықтан потенциалдық энергияны қатарлар дәрежесіне жіктейміз.

$$U = U_0 + \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{\partial U}{\partial R_{n\alpha}} \right)_0 r_{n\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_{n\alpha} \partial R_{m\beta}} \right)_0 r_{n\alpha} r_{m\beta}, \quad (2.1.6)$$

мұндағы $U_0 = U(\vec{l}_1, \vec{l}_2, \dots, \vec{l}_N)$, α, β - энергияның x, y, z осьтеріндегі проекциясы.

Жалпы жағдайдан өте аз ауытқу болғандықтан (2.1.6) теңдеудің екі мүшесі нөлге айналады

$$U = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_{n\alpha} \partial R_{m\beta}} \right)_0 r_{n\alpha} r_{m\beta}. \quad (2.1.7)$$

Кристалдарда $\left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_{n\alpha} \partial R_{m\beta}} \right)_0$ туындысы тек $(\vec{l}_n - \vec{l}_m)$ айырмасына тәуелді

болғандықтан

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial R_{n\alpha} \partial R_{m\beta}} \right)_0 = U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m). \quad (2.1.8)$$

(2.1.7) және (2.1.8) өрнектерден

$$U = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) r_{n\alpha} r_{m\beta}. \quad (2.1.9)$$

(2.1.9) теңдеуді $r_{m\beta}$ бойынша дифференциалдап, күштің проекциясы үшін теңдеу аламыз:

$$F_{m\beta} = -\frac{\partial U}{\partial r_{m\beta}} = -\sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) \cdot \vec{r}_{n\alpha}. \quad (2.1.10)$$

Ньютонның екінші заңына байланысты

$$F_{m\beta} = M\ddot{r}_{m\beta} = -\sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) \cdot \vec{r}_{n\alpha} . \quad (2.1.11)$$

(2.1.11) қозғалыс теңдеуінің шешімі болады, егер де $r_{m\beta}$ мынадай мән қабылдаса:

$$r_{m\beta} = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{q}} e_{\beta}(\vec{q}) \cdot A(\vec{q}) e^{i[\vec{q}\vec{l}_m - \omega(\vec{q})t]} , \quad (2.1.12)$$

мұндағы: $e_{\beta}(\vec{q})$ - заттық коэффициент.

(2.1.12) -дегі мәнді (2.1.11)-ге қойсақ, онда

$$\begin{aligned} M\ddot{r}_{m\beta} &= -\frac{M}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{q}} \omega^2(\vec{q}) e_{\beta}(\vec{q}) A(\vec{q}) e^{i[\vec{q}\vec{l}_m - \omega(\vec{q})t]} = \\ &= -\sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) \cdot \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{q}} e_{\alpha}(\vec{q}) A(\vec{q}) e^{i[\vec{q}\vec{l}_n - \omega(\vec{q})t]} \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

және осы теңдікті $e^{-i\vec{q}\vec{l}_m}$ -ге бөлеміз:

$$\left[M \sum_{\vec{q}} \omega^2(\vec{q}) e_{\beta}(\vec{q}) A(\vec{q}) - \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) \sum_{\vec{q}} e_{\alpha}(\vec{q}) A(\vec{q}) e^{i\vec{q}[\vec{l}_n - \vec{l}_m]} \right] e^{-i\omega(\vec{q})t} = 0 \quad (2.1.14)$$

жақшаның ішін өзара біріктіріп жазамыз. Бұл теңдіктің шешімі болады, егер жақшаның ішіндегілер өзара тең болса,

$$M\omega^2(\vec{q}) e_{\beta}(\vec{q}) A(\vec{q}) = \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) \cdot \sum_{\vec{q}} e_{\alpha}(\vec{q}) A(\vec{q}) e^{i\vec{q}[\vec{l}_n - \vec{l}_m]} \quad (2.1.15)$$

$$\vec{h} = \vec{l}_n - \vec{l}_m \quad (2.1.16)$$

белгілеуді енгізе отырып, мынадай өрнек аламыз:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{q}) = \frac{1}{M} \sum_{\vec{h}} U_{\alpha\beta}(\vec{h}) e^{i\vec{q}\vec{h}} . \quad (2.1.17)$$

(2.1.15)-теңдеуден

$$\omega^2(\vec{q}) e_{\beta}(\vec{q}) A(\vec{q}) = \sum_{\alpha=1}^3 G_{\alpha\beta}(\vec{q}) e_{\alpha}(\vec{q}) A(\vec{q}) , \quad (2.1.18)$$

бұл теңдеудің шешімі болады, егер де жүйенің алдындағы анықтауыштар нөлге тең болса:

$$\begin{vmatrix} [-\omega^2(\vec{q}) + G_{xx}(\vec{q})] & G_{xy}(\vec{q}) & G_{xz}(\vec{q}) \\ G_{xy}(\vec{q}) & [-\omega^2(\vec{q}) + G_{yy}(\vec{q})] & G_{zy}(\vec{q}) \\ G_{xz}(\vec{q}) & G_{yz}(\vec{q}) & [-\omega^2(\vec{q}) + G_{zz}(\vec{q})] \end{vmatrix} = 0 . \quad (2.1.19)$$

Үшінші дәрежелі (2.1.19) теңдеудің үш түбірі бар: $\omega_1^2(\vec{q})$, $\omega_2^2(\vec{q})$, $\omega_3^2(\vec{q})$.

Олай болса тербеліс жиілігі оң шама болып табылады

$$\omega = \omega_s(\vec{q}) \quad s = 1,2,3... \quad (2.1.20)$$

(2.1.18)-ге сәйкес (2.1.20)-дағы үш түбірге үш вектор $\vec{e}^{(s)}(\vec{q})$ тиісті. (2.1.17)-дегі $G_{\alpha\beta}(\vec{q})$ матрицасы өзара түйіндес болып табылады $G_{\alpha\beta}(\vec{q}) = G_{\beta\alpha}(-\vec{q})$, $G_{\beta\alpha}(-\vec{q}) = G_{\beta\alpha}^*(\vec{q})$. (2.1.9)-өрнекке сәйкес

$$U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) = U_{\beta\alpha}(\vec{l}_m - \vec{l}_n) \quad (2.1.21)$$

немесе (2.1.16)-ны ескеріп, мынаны аламыз

$$U_{\alpha\beta}(\vec{h}) = U_{\beta\alpha}(-\vec{h}) . \quad (2.1.22)$$

(2.1.17) және (2.1.22) өрнектерден түйіндес шарттары шығады

$$G_{\alpha\beta}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{h}} U_{\alpha\beta}(-\vec{h}) e^{-i\vec{q}\vec{h}} = G_{\beta\alpha}^*(\vec{q}). \quad (2.1.23)$$

Олай болса, $G_{\alpha\beta}(\vec{q}) = G_{\beta\alpha}(-\vec{q})$ өзара түйіндес болады.

$G_{\alpha\beta}(\vec{q}) = 0$ болғанда, функция нөл екендігін дәлелдейік. Ол үшін мынандай функция қарастырайық:

$$F_{m\beta} = - \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{l}_n - \vec{l}_m) \cdot \vec{r}_{n\alpha}. \quad (2.1.24)$$

(2.1.17)-өрнек бойынша

$$G_{\alpha\beta}(0) = \frac{1}{M} \sum_{\vec{h}} U_{\alpha\beta}(\vec{h}). \quad (2.1.25)$$

Егер кристалдық тор атомдарын өзара параллель бір кристалдық тұрақты a -ға ойша орын ауыстырсақ, ығысу күші кристалл тұтас қозғалғандықтан нөлге тең болады $F_{m\beta} = 0$, $r_{n\alpha} = a$, онда

$$- \sum_{n=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 U_{\alpha\beta}(\vec{h}) a = 0. \quad (2.1.26)$$

(2.1.26)-ның екі жағын да a -ға қысқартып, (2.1.16) ескеріп, аламыз

$$\sum_{\vec{h}} U_{\alpha\beta}(\vec{h}) = 0. \quad (2.27)$$

Осыдан және (2.1.25)-тен шығатыны

$$G_{\alpha\beta}(0) = 0. \quad (2.1.28)$$

(2.1.18) және (2.1.28) өрнектерге сәйкес $q \rightarrow 0$ болғанда $\omega_s(\vec{q})$ жиілігі нөлге ұмтылады.

Егер поляризация құбылысын ескеретін болсақ, гармоникалық тербелісті сипаттайтын функцияны былай жазамыз:

$$r_{m\beta} = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1}^3 e_{\beta}^{(s)}(\vec{q}) A_s(\vec{q}) e^{i[\vec{q}\vec{l}_m - \omega_s(\vec{q})t]}. \quad (2.1.29)$$

(2.1.12) шешімі кристалдың тербеліс энергиясын тәуелсіз гармоникалық осцилляторлардың энергияларының қосындасы ретінде алуға мүмкіндік береді. Шын мәнінде,

$$B_s(\vec{q}) = A_s(\vec{q}) e^{-i\omega_s(\vec{q})t} \quad (2.1.30)$$

қоя отырып, (2.1.29)-дан аламыз

$$r_{m\beta} = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1}^3 e_{\beta}^{(s)}(\vec{q}) B_s(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{l}_m}. \quad (2.1.31)$$

Осыдан

$$\dot{r}_{m\beta} = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1}^3 e_{\beta}^{(s)}(\vec{q}) \dot{B}_s(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{l}_m} \quad (2.1.32)$$

$$K = \frac{1}{2} M \sum_{n=1}^N \dot{r}_n^2 = \frac{1}{2} M \sum_{n=1}^N \sum_{\beta=1}^3 (\dot{r}_{n\beta})^2 \quad (2.1.33)$$

$$(\dot{r}_{n\beta})^2 = \frac{1}{NM} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}_1} \sum_{s=1}^3 \sum_{s_1=1}^3 e_{\beta}^{(s)}(\vec{q}) e_{\beta}^{(s_1)}(\vec{q}_1) \dot{B}_s(\vec{q}) \dot{B}_{s_1}(\vec{q}_1) e^{i[\vec{q} + \vec{q}_1]\vec{l}_n}. \quad (2.1.34)$$

(2.1.32) және (2.1.2) өрнектерден

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\bar{q}} \sum_{\bar{q}_1} \sum_{s=1}^3 \sum_{s_1=1}^3 e_{\beta}^{(s)}(\bar{q}) e_{\beta}^{(s_1)}(\bar{q}_1) \dot{B}_s(\bar{q}) \dot{B}_{s_1}(\bar{q}_1) \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i[\bar{q}+\bar{q}_1]\bar{l}_n}. \quad (2.1.35)$$

Егер де $\bar{q}_1 = -\bar{q}$ болса,

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i[\bar{q}+\bar{q}_1]\bar{l}_n} = 1, \quad (2.1.36)$$

онда

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 \sum_{s_1=1}^3 e_{\beta}^{(s)}(\bar{q}) e_{\beta}^{(s_1)}(-\bar{q}) \dot{B}_s(\bar{q}) \dot{B}_{s_1}(-\bar{q}). \quad (2.1.37)$$

$e_{\beta}^{(s)}(\bar{q}) = e_{\beta}^{(s)}(-\bar{q})$ өзара түйіндес функциялар, олардың көбейтіндісі $e_{\beta}^{(s)}(\bar{q}) e_{\beta}^{(s)}(-\bar{q}) = 1$

Кинетикалық энергия мәні

$$K = \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 \dot{B}_s(\bar{q}) \dot{B}_s(-\bar{q}). \quad (2.1.38)$$

Потенциалдық энергия мәні

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 \omega_s^2(\bar{q}) B_s(\bar{q}) B_s(-\bar{q}). \quad (2.1.39)$$

(2.1.38) және (2.1.39) өрнектерді (2.1.1)-ге қоямыз. Сонда

$$E = K + U = \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 [\dot{B}_s(\bar{q}) \dot{B}_s(-\bar{q}) + \omega_s^2(\bar{q}) B_s(\bar{q}) B_s(-\bar{q})] \quad (2.1.40)$$

немесе

$$E = \sum_{\bar{q}} \sum_s E_s(\bar{q}) \quad (2.1.41)$$

мұндағы

$$E_s(\bar{q}) = \frac{1}{2} \left[|\dot{B}_s(\bar{q})|^2 + \omega_s^2(\bar{q}) |B_s(\bar{q})|^2 \right]. \quad (2.1.42)$$

(2.1.40) және (2.1.41) теңдеулерінің (2.1.9)-нан айырмашылығы бұл теңдеулерде әртүрлі индекстері бар шамалардың болмауында. Сондықтан да (2.1.31) теңдеуді кәдімгі $r_{m\beta}$ координаталардан қалыпты $B_s(\bar{q})$ координатаға өту ретінде қарастыруға болады. Әрбір $B_s(\bar{q})$ координата гармоникалық осциллятор үшін қозғалыс теңдеуінің шешімі болып табылады. (2.1.30)-ды уақыт бойынша екі рет дифференциалдап, гармоникалық осциллятордың қозғалыс теңдеуін аламыз

$$\ddot{B}_s(\bar{q}) = -\omega_s^2(\bar{q}) B_s(\bar{q}). \quad (2.1.43)$$

Олай болса, $B_s(\bar{q})$ қалыпты координата жиілігі $\omega_s(\bar{q})$ және энергиясы $E_s(\bar{q})$ (2.1.42)-теңдеуден анықталатын тәуелсіз осциллятор тербелісін сипаттайды. Кристалл атомдарының тербеліс энергиясы (2.1.41) бір-біріне байланыссыз гармоникалық осцилляторлардың тербеліс энергияларының қосындысынан тұрады.

2.2 Кристалдық тор тербелісінің кванттық теориясы

Классикалық механикадан кванттық механикаға өту кезінде бөлшектің координатасы q мен оның импульсі p операторлармен ауыстырылатыны белгілі. Ол үшін кванттық механикадан мына теңдікті пайдаланамыз:

$$[qp] = qp - pq = i\hbar. \quad (2.2.1)$$

$B_s(\bar{q})$ қалыпты координатаға сәйкес келетін жалпыланған импульс теңдеуі

$$p_s(\bar{q}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{B}_s(\bar{q})}, \quad (2.2.2)$$

мұндағы

$$L = K - U \quad (2.2.3)$$

- Лагранждың классикалық функциясы. (2.2.3)-ке (2.1.38) және (2.1.39)-дағы мәндерді қойып, мынаны аламыз

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 [\dot{B}_s(\bar{q})\dot{B}_s(-\bar{q}) - \omega_s^2(\bar{q})B_s(\bar{q})B_s(-\bar{q})]. \quad (2.2.4)$$

(2.2.4) -тен $\dot{B}_s(\bar{q})$ дифференциалдап алсақ, мынаны аламыз:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{B}_s(\bar{q})} = \dot{B}_s(-\bar{q}). \quad (2.2.5)$$

(2.2.4) және (2.2.2) өрнектерін салыстырсақ:

$$\begin{cases} p_s(\bar{q}) = \dot{B}_s(-\bar{q}) \\ p_s(-\bar{q}) = \dot{B}_s(\bar{q}) \end{cases}. \quad (2.2.6)$$

Енді (2.1.40) тан (2.2.6)-ны ескеріп аламыз

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 [p_s(\bar{q})p_s(-\bar{q}) + \omega_s^2(\bar{q})B_s(\bar{q})B_s(-\bar{q})]. \quad (2.2.7)$$

Осы теңдеуді оператор түрінде жазамыз:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 [\hat{p}_s(\bar{q})\hat{p}_s(-\bar{q}) + \omega_s^2(\bar{q})\hat{B}_s(\bar{q})\hat{B}_s(-\bar{q})]. \quad (2.2.8)$$

(2.2.8) формуладағы \hat{H} гамильтониан операторын әртүрлі айнымалылардан бір мәнді операторға келтіру үшін Эрмит операторы қолданылады:

$$\begin{cases} B_s(\bar{q}) = e_\alpha(\bar{q})(a_{\bar{q}s} + a_{-\bar{q}s}^+) & B_s(-\bar{q}) = e_\alpha(\bar{q})(a_{-\bar{q}s} + a_{\bar{q}s}^+) \\ p_s(\bar{q}) = e_\beta(\bar{q})(a_{-\bar{q}s} - a_{\bar{q}s}^+) & p_s(-\bar{q}) = e_\beta(\bar{q})(a_{\bar{q}s} - a_{-\bar{q}s}^+) \end{cases}, \quad (2.2.9)$$

мұндағы $a_{\bar{q}s}$ және $a_{-\bar{q}s}^+$ -операторлар ($a_{-\bar{q}s}^+$ -операторы $a_{\bar{q}s}$ -ға түйіндес), ал $e_\alpha(\bar{q})$ және $e_\beta(\bar{q})$ -коэффициенттер.(2.2.9)-ды (2.2.8)-ге қоямыз

$$\hat{H} = \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 \hbar \omega_s(\bar{q}) \left(a_{\bar{q}s} a_{\bar{q}s}^+ + \frac{1}{2} \right). \quad (2.2.10)$$

Екі оператордың көбейтіндісі нөлге тең болса $a_{\bar{q}s} a_{\bar{q}s}^+ = v_{\bar{q}s} = 0$, (2.2.10) теңдіктен мына мәнді аламыз:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\bar{q}} \sum_{s=1}^3 \hbar \omega_s(\bar{q}) = E_0, \quad (2.2.11)$$

E_0 - нөлдік тербеліс, яғни төменгі температура кезінде де тербеліс күйінде қалады.

Ал $n_{\bar{q}s}$ оператордың меншікті мәні

$$v_{\bar{q}s} = 0, 1, 2, 3, 4, \dots \quad (2.2.12)$$

Сонымен кристалл торы тербелісінің гамильтонианы (2.2.10)-ның меншікті мәні болады

$$E = \sum_{\vec{q}} \sum_{s=1} E_s(\vec{q}). \quad (2.2.13)$$

мұндағы

$$E_s(\vec{q}) = \hbar \omega_s(\vec{q}) \left(v_{\vec{q}s} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.2.14)$$

($v_{\vec{q}s}$ - (2.2.12) өрнегінен анықталады). Кванттық механикадан белгілі болғандай (2.2.14) формула жиілігі $\omega_s(\vec{q})$ сызықты гармоникалық осциллятордың энергиясын анықтайды. Демек кристалдың тербеліс энергиясы кванттық теорияға сәйкес классикалық теориядағы секілді тәуелсіз гармоникалық осцилляторлардың энергияларының қосындысы болып табылады. Оның классикалық теориядан өзгешелігі әрбір оператордың энергиясы (2.1.42) өрнекпен емес, нольдік тербеліс энергиясы бар (2.2.14) өрнегімен анықталады.

2.3 Квазибөлшек әдісі. Фонондар

Заттың макроскопиялық қасиеттерін теориялық түрде қарастырғанда өзара әсерлесетін бөлшектер санының өте көптігі қиындық туғызады. Сондықтан жуықтау әдістері қолданылады, олардың бірі квазибөлшек әдісі.

Квазибөлшектер туралы ұғымды асқын аққыштықтың теориясын жасағанда макроскопиялық дененің энергетикалық спектрін зерттеу кезінде 1940-1941 жылдары Л.Д.Ландау енгізді.

Макроскопиялық дененің әлсіз қозған күйіндегі энергиясы квазибөлшектер энергияларының қосындысы болып табылады

$$E = \sum_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}) n_{\vec{p}}, \quad (2.3.1)$$

мұндағы: $n_{\vec{p}}$ - импульсі \vec{p} және энергиясы $\varepsilon(\vec{p})$ болатын квазибөлшектер саны.

Квазибөлшектердің кәдімгі бөлшектерден айырмашылығы олар макроскопиялық денелерден тыс жерде болмайды.

$T \neq 0$ болғанда квазибөлшектер газының энергиясы мына өрнекпен анықталады.

$$E = \int \mathcal{E}(\varepsilon, T) Z(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.3.2)$$

мұндағы: $f(\varepsilon, T)$ - T температурадағы энергиясы ε күйіндегі квазибөлшектердің орташа санына тең таралу функциясы.

Квазибөлшектің жылдамдығы

$$\vec{v} = \text{grad}_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}). \quad (2.3.3)$$

Квазибөлшектер ағыны

$$\vec{j} = \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} \text{grad}_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}). \quad (2.3.4)$$

Ал квазибөлшектер газының толық импульсі

$$\vec{P} = \sum_{\vec{p}} \vec{p} n_{\vec{p}}. \quad (2.3.5)$$

Квазибөлшектер энергия тасымалдайды. Энергия тасымалы былай анықталады

$$\vec{U} = \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}) \text{grad}_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}) . \quad (2.3.6)$$

Макроскопиялық денеде түрлі квазибөлшектер кездеседі. Ол кезде (2.3.2) өрнек былай жазылады

$$E = \sum_{s=1}^p \int \mathcal{E}_s(\varepsilon, T) Z_s(\varepsilon) d\varepsilon , \quad (2.3.7)$$

мұндағы: p - квазибөлшек түрлерінің саны.

Ал квазибөлшектің өмір сүру уақытын τ десек, онда оның энергиясының анықталмағандығы былай болады

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\tau} . \quad (2.3.8)$$

Квазибөлшектердің әрқайсының энергиясы

$$\varepsilon_s = \hbar \omega_s(\vec{q}) \quad (2.3.9)$$

және квазиимпульсі

$$\vec{p} = \hbar \vec{q} . \quad (2.3.10)$$

Осы (2.3.9) және (2.3.10) теңдіктерімен анықталатын квазибөлшектер фонондар деп аталады. Кристалл тербелісін фонондардың жиынтығы ретінде қарау идеясын 1930 жылы И. Е. Тамм ұсынды. Жылулық тепе-теңдікте $\hbar \omega_s(\vec{q})$ энергиясы бар фонондардың орташа саны мына өрнекпен анықталады

$$n_{\vec{q} s} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_s(\vec{q})}{k_B T}} - 1} . \quad (2.3.11)$$

Ал фонондық газда торлық жылу өткізгіштік болады. Фонондармен тасымалданатын жылу ағыны мынадай өрнекпен анықталады

$$\vec{Q} = \sum_{\vec{q}} \sum_s n_{\vec{q} s} \hbar \omega_s(\vec{q}) \text{grad}_{\vec{q}} \omega_s(\vec{q}) . \quad (2.3.12)$$

Жылулық тепе-теңдік жағдайында, (2.3.11) өрнегі қолданылған кезде, фонондардың квазиимпульстар бойынша таралуы изотропты болып табылады және (2.3.12) өрнектегі жылу ағыны нөлге тең болады.

2.4 Қатты денелердің жоғарғы және төменгі температуралардағы жылу сыйымдылығы

Классикалық теорияда қатты дененің жылу сыйымдылығы $3N$ тәуелсіз сызықты гармоникалық осцилляторлар жиынтығы деп қарастырылады (әрбір атом үш еркіндік дәрежесіне ие болады). Классикалық статистика бойынша әрбір сызықтық гармоникалық осциллятордың орташа энергиясы:

$$\bar{\varepsilon} = k_B T . \quad (2.4.1)$$

Сонда жалпы кристалдың, яғни $3N$ сызықтық осцилляторлар жиынының орташа жылулық энергиясы:

$$\bar{E} = 3N\bar{\varepsilon} = 3Nk_B T , \quad (2.4.2)$$

мұндағы: 3-еркіндік дәрежесі, N –бөлшектер саны. Массасы мольдік массаға тең атомдар үшін $N = N_A = 6 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$ және Авогадро саны деп аталады.

Қатты дененің тұрақты көлемдегі жылу сыйымдылығы:

$$C_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = 3N_A k_B = 3R, \quad (2.4.3)$$

мұндағы: R -универсал газ тұрақтысы.

(2.4.3) теңдеуден қатты дененің жылу сыйымдылығы температураға тәуелсіз және барлық қатты денелер үшін тұрақты шама $C_V = 3R$ екендігі айқын. Бұл жеткілікті жоғары температура аумағында жасалған эксперименттерде де дәлелденген. 1819 жылы француз оқымыстылары Дьюлонг мен Пти ашқан заң бойынша бөлме температурасында қатты күйдегі элементтердің көбінде 1 моль жылу сыйымдылық $3R$ -ге жуық. Ал практикада температураға байланысты, температура азайған сайын жылу сыйымдылық азаятындығын көреміз.

Жылу сыйымдылықтың температураға байланысына 1906 ж А. Эйнштейн алғаш рет кванттық теория тұрғысынан түсінік берді. Ол негізінен Дьюлонг-Пти идеясын, яғни кристалл $3N$ сызықтық гармоникалық осциллятор жиынынан тұрады және әрбір осциллятор энергиясы үздіксіз емес, үздікті, дискретті квантты түрде өзгереді деп тұжырымдады және бұл осциллятордың жиіліктері бірдей, яғни кристалдардағы атомдар бірдей жиілікте тербеледі. Классикалық осцилляторды кванттық осцилляторға айналдырады.

1) $3N$ 2) $3N$ $\omega = \omega_0$

Бұл жағдайда сызықтық гармоникалық осциллятордың орташа энергиясы:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar \omega_0}{e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1}. \quad (2.4.4)$$

Олай болса,

$$\bar{E} = 3N \frac{\hbar \omega_0}{e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1}. \quad (2.4.5)$$

Тұрақты көлемдегі жылу сыйымдылығы

$$C_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = 3N \hbar \omega_0 \left[\frac{1}{(e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1)^2} \right] = \left(\frac{1}{x} \right)' = -\frac{1}{x^2} = 3N \hbar \omega_0 \left[-\frac{1}{(e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1)} \right]^2 e^{\hbar \omega_0 / k_B T} \left(-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T^2} \right) = \quad (2.4.6)$$

$$\left| \frac{k_B}{k_B} \right| = 3N k_B \left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega_0 / k_B T}}{(e^{\hbar \omega_0 / k_B T} - 1)^2} = \left| \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} = x \right| = 3N k_B f(x),$$

мұнда

$$f(x) = x^2 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (2.4.7)$$

- Эйнштейн функциясы енгізілген. Эйнштейн функциясы температура төмендеген сайын жылу сыйымдылықтың $C_V \ll 3R$ -шамасына азаятындығын көрсетеді.

1) $x = \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \ll 1$, жоғарғы температурада $x \rightarrow 0$ өте аз шама, сондықтан алымындағы $e^x \rightarrow 1$ ұмтылады дейміз, $e^x = 1 + x$ қатарға жіктейміз

$$f(x) = x^2 \frac{1}{(1 + x - 1)^2} = 1. \quad (2.4.8)$$

Жоғарғы температурада Эйнштейн функциясы бірге тең, олай болса, Дьюлонг-Пти заңдылығы толығымен орындалады.

2) $x = \frac{\hbar\omega_{\text{эйну}}}{k_B T} \gg 1$, төменгі температурада

$$f(x) = x^2 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} = \frac{x^2}{e^x - 1 + \frac{1}{e^x}} = x^2 e^{-x}. \quad (2.4.9)$$

Жылу сыйымдылықтың жалпы формуласы:

$$C_V = 3Nk_B f(x) = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 e^{-\hbar\omega/k_B T}. \quad (2.4.10)$$

Тұрақтыларын ескермей жазсақ, онда $C_V \sim e^{-\frac{1}{T}}$.

Эйнштейн теоремасы бойынша заттың жылулық сыйымдылығы температураға байланысты экспоненциал азаяды. Бұл заңдылық тәжірибе нәтижелерін сапа жағынан толық қанағаттандырады, сандық жағынан толық сипаттамайды.

Жылу сыйымдылық теориясын одан әрі дамытқан П. Дебай 1912 жылы төменгі температура бөлігі үшін эксперименттік нәтижелерді толық қанағаттандыратын, кванттық механика тұрғысынан ойға қонымды теория жасады. Дебай Эйнштейн идеясын толық сақтай отырып, яғни кристалл $3N$ кванттық осциллятор жүйесінен тұрады және кванттық осциллятор жиілігі тұрақты емес деп қарастырады. $3N\omega = \omega_s(\vec{q})$. \vec{q} -толқындық вектор. Сонымен бірге мынандай шартты қанағаттандырады

$$3N = \int_0^{\omega_p} D(\omega) d\omega_s(\vec{q}), \quad (2.4.11)$$

мұндағы $D(\omega)$ -жиіліктің таралу функциясы.

Бұл жағдайда әрбір кванттық осциллятордың орташа энергиясы

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar\omega_s(\vec{q})}{e^{\hbar\omega_s(\vec{q})/k_B T} - 1}. \quad (2.4.12)$$

Кристалдың орташа жылу энергиясы

$$\bar{E} = 3N\bar{\varepsilon} = \int_0^{\omega_p} D(\omega) \frac{\hbar\omega_s(\vec{q})}{e^{\hbar\omega_s(\vec{q})/k_B T} - 1} d\omega_s(\vec{q}). \quad (2.4.13)$$

(2.4.13) формуладан энергияның орташа мәнін табу үшін жиіліктің таралу функциясын анықтау керек.

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega}, \quad (2.4.14)$$

мұндағы N -тербеліске қатысты барлық атомдар саны, радиусы толқындық вектормен сипатталатын сфера көлемін бірлік өлшем көлем арқылы өткен атомдар санына көбейткенге тең

$$N = \left(\frac{h}{2\pi} \right)^3 \frac{4}{3} \pi \vec{q}^3 = \left| \vec{q} = \frac{\omega_s(\vec{q})}{\vec{g}} \right| = \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega_s^3(\vec{q})}{g^3}. \quad (2.4.15)$$

Дебай болжамы бойынша ортаны үздіксіз деп алып, ондағы таралған толқынның толқындық векторы

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega_s^2(\bar{q})}{g^3}. \quad (2.4.16)$$

Дебай шарты бойынша $D(\omega)$ толқындық функцияның шектік мәнін қарастырамыз:

$$\frac{V}{2\pi^2 g^3} \int_0^{\omega_D} \omega_s^2(\bar{q}) d\omega = 3N, \quad \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega_D^3}{g^3} = 3N, \quad \frac{V}{2\pi^2 g^3} = \frac{9N}{\omega_D^3},$$

$$D(\omega) = \frac{9N\omega_s^2(\bar{q})}{\omega_D^3}. \quad (2.4.17)$$

(2.4.17)-ні (2.4.13) өрнекке қоямыз:

$$\bar{E} = 3N\bar{\varepsilon} = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} D(\omega) \frac{\omega_s^3(\bar{q})}{e^{\hbar\omega_s(\bar{q})/k_B T} - 1} d\omega_s(\bar{q}) = \left| \frac{\hbar\omega}{k_B T} = x \right| = 9Nk_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

$$D(x) = 3 \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 \int_0^x \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (2.4.18)$$

(2.4.18) өрнегі Дебай функциясы деп аталады. Мұндағы $\frac{\hbar\omega}{k_B} = \theta$ - Дебай температурасы деп аталады.

Олай болса

$$\bar{E} = 3Nk_B T D(x) \quad (2.4.19)$$

1) Жоғарғы температура үшін: $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} = \frac{\theta}{T} \ll 1, \quad x \rightarrow 0$

$$D(x) = 3 \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^x \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = |e^x = 1 + x| = 3 \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^x x^2 dx = 3 \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \frac{1}{3} \left(\frac{\theta}{T} \right)^3 = 1 \quad (2.4.20)$$

Жоғарғы температурада Дебай функциясы бірге тең, яғни Дьюлонг-Пти заңдылығы орындалады.

2) Төменгі температура үшін: $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} = \frac{\theta}{T} \gg 1, \quad x \rightarrow \infty$

$$D(x) = 3 \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \left| \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \right| = \frac{1}{5} \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \pi^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (2.4.21)$$

$$\bar{E} = 3Nk_B T D(x) = \frac{3}{5} Nk_B \frac{T^4}{\theta^3} \pi^4. \quad (2.4.22)$$

Осы теңдеуді температура бойынша дифференциалдап, мынадай теңдеу аламыз:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \frac{12}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \pi^4, \quad (2.4.23)$$

яғни $C_V \sim T^3$.

Дебай формуласындағы жылу сыйымдылығы температураға байланысты, яғни температураның азаюына сәйкес азаятындығын, эксперименттік нәтижелерін сандық, сапалық жағынан толық қанағаттандыратынын және кристалл ішінде жылу сыйымдылық фонндардың тербелісіне байланысты өзгеретіндігін тағайындайды.

3 МЕТАЛДАҒЫ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ГАЗ

3.1 Квазиимпульстің дисперсия заңы және эффектілік масса әдісі

Кристалл үшін Шредингер теңдеуін есептегенде электронға кристалдық тор әсерін ескермедік, ал шындығында кез келген кристалл оң және теріс иондардан немесе жалпы зарядтардан тұрады. Кристалл құрамында бұл зарядталған бөлшектердің электронға әсерін ескере отырып, Шредингер теңдеуі толық жуықтау мәнін қабылдау үшін эффектілік масса ұғымын енгіземіз. Эффектілік масса электрон мен кемтіктің өзара энергетикалық эквиваленттілігін сақтайтын коэффициент деп түсінуге болады. Шекті жағдайда не электронның не кемтіктің массасына тең электронға кристалдық өрістің әсерін зерттеу үшін сол кристалдың өте аз мәнге болса да өзгерісін қарастырамыз. Кристалдық тордың толқындық векторын (\vec{k}) өте аз өзгерісті ескеріп, мына түрде жазамыз: $\vec{k} = \vec{k}_0 + (\vec{k} - \vec{k}_0)$. Соған байланысты энергия:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + E(\vec{k} - \vec{k}_0) \quad (3.1.1)$$

$\vec{k} - \vec{k}_0$ өзгерісі өте аз болғандықтан энергияны мынандай қатарға жіктейміз:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial E}{\partial k_{\alpha}} \Big|_0 (k_{\alpha} - k_{0,\alpha}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial^2 E}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} \Big|_0 (k_{\alpha} - k_{0,\alpha})(k_{\beta} - k_{0,\beta}) + \dots, \quad (3.1.2)$$

мұндағы «0» индексі энергияның I, II ретті туындыларының тепе-теңдік қалыптан ауытқуының ескеретіндігін көрсетеді. α, β - x, y, z осьтеріндегі проекциясын көрсетеді. Энергияның I ретті туындысындағы ауытқу өте аз болғандықтан $k_{\alpha} - k_{0,\alpha}$ нөлге тең болады да, (3.1.2)-өрнектен

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \frac{\partial^2 E}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} \Big|_0 (k_{\alpha} - k_{0,\alpha})(k_{\beta} - k_{0,\beta}) \quad (3.1.3)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\hbar^2 \partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} = \left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n. \quad (3.1.4)$$

(3.3) теңдікті, яғни эффектілік массаның кері шамасының өзара симметриялы екендігін дәлелдейміз.

$$\left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n = \left(\frac{1}{m_{\alpha}} \right)_n \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.1.5)$$

δ - өткізу (өткеру) коэффициенті деп аталады.

$$\left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n = \begin{vmatrix} m_{xx}^{-1} & m_{xy}^{-1} & m_{xz}^{-1} \\ m_{yx}^{-1} & m_{yy}^{-1} & m_{yz}^{-1} \\ m_{zx}^{-1} & m_{zy}^{-1} & m_{zz}^{-1} \end{vmatrix}. \quad (3.1.6)$$

(3.1.6) формуладағы негізгі диагональ ось бойынша симметрияда тек қана сол ось бойындағы құраушылар нөлге тең болмайды ($m_{xx}^{-1} m_{yy}^{-1} m_{zz}^{-1}$), ал басқа құраушылары нөлге тең болады.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ m_\alpha \end{pmatrix}_n = \begin{vmatrix} m_{xx}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz}^{-1} \end{vmatrix}. \quad (3.1.7)$$

(3.1.6) және (3.1.7) теңдіктері өзара тең.

(3.1.3)-(3.1.5) формулаларды ескере отырып, (3.1.4) формуланы мына түрде жазамыз:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{1}{m_\alpha} \right) (k_\alpha - k_{0,\alpha})^2, \quad k_{\alpha\beta} = k_{\beta\alpha} \quad (3.1.8)$$

ортақ бөлімге келтіреміз:

$$2[E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0)] \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{m_\alpha}{\hbar^2} \right) = \sum_{\alpha=1}^3 (k_\alpha - k_{0,\alpha})^2, \quad (3.1.9)$$

$$\sum_{\alpha=1}^3 \frac{2(m_\alpha)_n}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0)] = \sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha^2, \quad (3.1.10)$$

мұндағы

$$\sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha^2 = \sum_{\alpha=1}^3 (k_\alpha - k_{0,\alpha})^2. \quad (3.1.11)$$

(3.1.11) теңдеудің екі жағын да $\sum_{\alpha=1}^3 a_\alpha^2$ -ға бөлеміз

$$\sum_{\alpha=1}^3 \frac{(k_\alpha - k_{0,\alpha})^2}{a_\alpha^2} = 1. \quad (3.1.12)$$

Құраушылары арқылы жазамыз

$$\frac{(k_x - k_{0,x})^2}{a_x^2} + \frac{(k_y - k_{0,y})^2}{a_y^2} + \frac{(k_z - k_{0,z})^2}{a_z^2} = 1. \quad (3.1.13)$$

(3.1.13)-формула эллипсоидтың канондық теңдеуі болғандықтан кристалл энергиясы максимум және минимум мәндерінде эллипсоид формада өзгереді. Энергия өзгерісінің максимум және минимум мәндерін мынадай теңдік бойынша зерттейміз:

$$E(\vec{k}) = -|A|(\cos k_x a + \cos k_y a) \quad (3.1.14)$$

$\cos k_x$ мәндерін қарастырамыз: $k_x a = 2\pi n_1$, $k_y a = 2\pi n_2$ (n_1, n_2 - бүтін сандар) болғанда

(3.1.14)-теңдеу $-2|A|$ -ға тең m минимумға ие болады. Косинустың мәндері өте аз шама болғандықтан қатарға жіктейміз. $\cos k_x = 1 - \frac{1}{2}(k_x)^2$ заңдылығына

байланысты

$$\left. \begin{aligned} \cos(k_x a - 2\pi n_1) &= 1 - \frac{1}{2}[k_x a - 2\pi n_1]^2 \\ \cos(k_y a - 2\pi n_2) &= 1 - \frac{1}{2}[k_y a - 2\pi n_2]^2 \end{aligned} \right\} \quad (3.1.15)$$

болғанда, минимумға жақын жерде изоэнергетикалық сызықтар шеңберлер түрінде болады. Осы мәндердің бәрін (3.1.14) теңдеуге қоямыз

$$E(k) = -|A| \left\{ 2 - \frac{1}{2} \left[(k_x a - 2\pi n_1)^2 + (k_y a - 2\pi n_2)^2 \right] \right\} \quad (3.1.16)$$

$$(k_x a - 2\pi n_1)^2 + (k_y a - 2\pi n_2)^2 = const. \quad (3.1.17)$$

(3.1.16) теңдеуді одан әрі түрлендіреміз

$$2 \left[\frac{E(k)}{|A|} + 2 \right] = const \quad (3.1.18)$$

k_x мәндерін жазып қоямыз: $k_x a = (2n_1 + 1)\pi$, $k_y a = (2n_2 + 1)\pi$, $\cos k_x = +1, -1$ болғанда (3.1.14)-теңдеу $2|A|$ -ға тең M максимумға ие болады.

Максимумға жақын жерде

$$\left. \begin{aligned} \cos[k_x a - (2n_1 + 1)\pi] &= \frac{1}{2} [k_x a - (2n_1 + 1)\pi]^2 - 1 \\ \cos[k_y a - (2n_2 + 1)\pi] &= \frac{1}{2} [k_y a - (2n_2 + 1)\pi]^2 - 1 \end{aligned} \right\}, \quad (3.1.19)$$

болғанда, изоэнергетикалық сызықтар шеңберлер болып табылады

$$E(k) = -|A| \left[\left\{ -2 + \frac{1}{2} const \right\} \right], \quad (3.1.20)$$

$$const = [k_x a - \pi(2n_1 + 1)]^2 + [k_y a - \pi(2n_2 + 1)]^2 \quad (3.1.21)$$

$$2 \left[2 - \frac{E(k)}{|A|} \right] = const. \quad (3.1.22)$$

Энергияның максимум және минимум мәнінде де тұрақтының мәні шеңбердің теңдеуін береді. Энергияның максимум және минимум мәндері шеңбер теңдеуімен өзгереді.

Егер де $(k_x + k_y)a = 2n_1 + \pi$, $(k_x - k_y)a = 2n_2 + \pi$, онда (3.1.14) теңдеу түзу сызықтың теңдеуін береді, мұндай теңдеумен сипатталатын энергетикалық бетті изоэнергетикалық беттер деп атайды. Изоэнергетикалық беттердің қиылысу нүктесі орнықты нүкте деп аталады.

- 1) Егер де электрон минималды энергия қабылдаса, яғни $E(k) - E(k_0) < 0$ болса, басқаша айтқанда, электрон өткізгіштік зонаның ең төменгі аймағында орналасса, онда эффектiлiк масса оң мән қабылдайды және бұл жағдайда эффектiлiк масса электронның өз массасына тең болады.
- 2) Егер де «электрон» энергиясы максимум мән қабылдағанда, $E(k) - E(k_0) > 0$ болса, басқаша айтқанда «электрон» валенттік зонаның ең жоғарғы аймағында орналасса, онда оның эффектiлiк массасы терiс мән қабылдайды. Массасы терiс мән қабылдайтындарды кемтiктер деп атайды. $m^* < 0$

3.2 Ферми беті

Паули принципі бойынша $(\vec{k}\sigma)$ күйдің электрондармен толтырылу саны не 1-ге, не 0-ге тең. Сондықтан электрондар Ферми-Дирак статистикасына бағынады. Берілген спин проекциясындағы электрондардың таралу функциясы былай анықталады

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega - \xi}{kT}} + 1}, \quad (3.2.1)$$

мұндағы ξ - Ферми энергиясы.

E -нің мәнін түсіну үшін: $e^{-\infty} \rightarrow 0$, $T=0$

$$f(E) = \int_E N(E) dE. \quad (3.2.2)$$

$f(E)$ функциясын кристалдың тығыздығы арқылы зерттейміз. $N(E)$ -энергияның тығыздығы.

$$N(E) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \pi \frac{\omega^3}{g^3}, \quad N(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi \frac{\omega^3}{g^3} = \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega^3}{g^3}, \quad N(E) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{g^3}$$

$$f(E) = \int_E N(E) dE = \frac{1}{2\pi^2 g^3} \int_E dE = \frac{E}{2\pi^2 g^3}, \quad (3.2.3)$$

$$f[E(\vec{k})] = \frac{1}{e^{\frac{E(\vec{k}) - \xi}{kT}} + 1}, \quad (3.2.4)$$

мұндағы: f - Ферми-Дирак статистикасы бойынша таралу, E - Ферми-Дирак энергиясы.

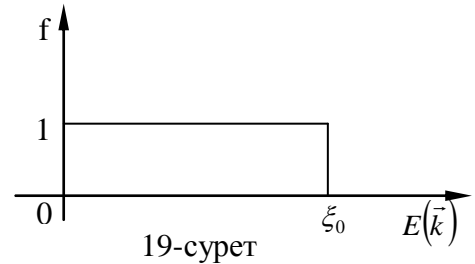
$T=0$ болғанда (3.2.4) функциясы 1 мәнін қабылдайды, егер $E(\vec{k}) < \xi_0$ болса, 0 мәнін қабылдайды, егер $E(\vec{k}) > \xi_0$ болса (19-сурет). Сондықтан ξ_0 Ферми деңгейі $T=0$ болғанда электрондардың ең жоғары энергиясына тең болады.

Ферми энергиясы $T > 0$ болғанда мынандай шарт бойынша анықталады:

$$n = \int_0^{\infty} f(E) N(E) dE, \quad (3.2.5)$$

мұндағы: n - Ферми бетіндегі электронның концентрациясы, $N(E)$ - күй тығыздығы, $N(E)dE$ - энергияның E -ден $E + \Delta E$ мәнге өзгергендегі бірлік көлемдегі күй саны. Егер $T=0$ болса, онда (3.2.5) өрнектен

$$n = \int_0^{\xi_0} N(E) dE. \quad (3.2.6)$$



(3.2.6) теңдеуден күй санын анықтаймыз

$$N(E) dE = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{E(\vec{k})} d\vec{k}. \quad (3.2.7)$$

2 көбейткіші мүмкін болатын екі спин проекциясын ескеріп тұр. k - кеңістігін элементар цилиндр тәрізді деп қарастырып, биіктігін dk_n , табанының ауданын dS деп белгілейік. Сонда (3.2.7) өрнек бойынша аламыз

$$N(E) dE = \frac{V \cdot 2}{(2\pi)^3} \int_{E(\vec{k})} d\vec{k}_V = \left| \frac{V=1}{d\vec{k}_V = d\vec{k}_n dS} \right| = \frac{1}{4\pi^3} \int_S d\vec{k}_n dS. \quad (3.2.8)$$

(3.2.8) формуланы dE -ге бөлеміз, сонда:

$$N(E) = \frac{1}{4\pi^3} \int_S \frac{d\vec{k}_n}{dE} dS, \quad (3.2.9)$$

егер

$$\frac{dE}{dk_n} = \left| \text{grad}_{\vec{k}} E \right| \quad (3.2.10)$$

болса, онда

$$N(E) = \frac{1}{4\pi^3} \int_S \frac{dS}{|\text{grad}_{\vec{k}} E|} . \quad (3.2.11)$$

$\bar{g} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_{\vec{k}} E$, $\text{grad}_n E = \mathcal{G}\hbar$ формулаларын ескеріп, (3.2.11) тен мынадай өрнек аламыз

$$N(E) = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int_S \frac{dS}{\mathcal{G}} . \quad (3.2.12)$$

(3.2.8) және (3.2.10) теңдеулер арқылы Ферми бетін анықтаймыз.

1) Энергияның бірінші жағдайында электронның энергиясы дисперсияның изотропты квадраттық заңы бойынша өзгерсін. Сонда

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} , \quad (3.2.13)$$

(мұндағы m^* - эффективтік масса), изоэнергетикалық бет сфера формасын қабылдайды. Осы кезде $k_n = k$ және (3.2.10) өрнек мына түрде жазылады

$$dE = \frac{\hbar^2}{2m^*} 2k dk , \quad \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m^*} . \quad (3.2.14)$$

(3.2.14) және (3.2.11) формулалардан

$$N(E) = \frac{1}{4\pi^3} \int_S \frac{m^*}{\hbar^2 k} dS = |k = \text{const}| = \frac{m^*}{4\pi^3 \hbar^2 k} \int dS = \frac{m^*}{4\pi^3 \hbar^2 k} S = |S = 4\pi k^2| = \frac{m^* k}{\pi^2 \hbar^2} . \quad (3.2.15)$$

(3.2.15) формулаға (3.2.13) формуладан k -ның мәнін $k = \frac{2^{\frac{1}{2}} (m^*)^{\frac{1}{2}} E^{\frac{1}{2}}}{\hbar}$ тауып, орнына қоямыз. Сонда

$$N(E) = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2} \cdot \frac{2^{\frac{1}{2}} (m^*)^{\frac{1}{2}} E^{\frac{1}{2}}}{\hbar} = \frac{2^{\frac{1}{2}} (m^*)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} . \quad (3.2.16)$$

(3.2.16) теңдеуді мына түрде жазамыз

$$N(E) = A\sqrt{E} . \quad (3.2.17)$$

Олай болса

$$A = \frac{2^{\frac{1}{2}} (m^*)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} . \quad (3.2.18)$$

(3.2.17) теңдеуді (3.2.6) формулаға қоямыз:

$$n = \frac{2}{3} A \xi_0^{3/2} , \quad (3.2.19)$$

осыдан

$$\xi_0 = \left(\frac{3n}{2A} \right)^{2/3} . \quad (3.2.20)$$

(3.2.18)-дегі A мәнін қоя отырып, $T=0$ кездегі Ферми энергиясы үшін мынадай өрнек аламыз

$$\xi_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3n\pi^2)^{2/3} , \quad (3.2.21)$$

ξ_0 - Ферми энергиясының сан мәні.

2) Екінші жағдайда электронның энергиясы квадратты анизотропты дисперсия заңы бойынша өзгерсін

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z}, \quad (3.2.22)$$

(мұндағы m_x, m_y, m_z - оң эффективтілік массалар), онда изоэнергетикалық беттік эллипсоид формада өзгереді. Енді мынандай белгілеу

$$k_x = \sqrt{m_x} k'_x, \quad k_y = \sqrt{m_y} k'_y, \quad k_z = \sqrt{m_z} k'_z \quad (3.2.23)$$

енгізе отырып, (3.2.22) теңдеуді былай жазамыз

$$E = \frac{\hbar^2}{2} (k')^2. \quad (3.2.24)$$

k және k' -кеңістіктерін өзара түйіндес екендігін жазамыз

$$dk = dk_x dk_y dk_z = (m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}} dk'_x dk'_y dk'_z = (m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}} dk' \quad (3.2.25)$$

немесе $k = (m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}} k'$. (3.2.15) формуладағы $N(E) = \frac{m^* k}{\pi^2 \hbar^2}$ сияқты энергияның эллипсоид тәрізді өзгеретін күй тығыздығын мынадай түрде жазамыз

$$N(E) = \frac{(m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}} k'}{\pi^2 \hbar^2}. \quad (3.2.26)$$

(3.2.24)-тен $k' = \frac{2^{\frac{1}{2}} E^{\frac{1}{2}}}{\hbar}$, оны (3.2.26)-ға қоямыз. Сонда

$$N(E) = \frac{(m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}}}{\pi^2 \hbar^2} \frac{2^{\frac{1}{2}} E^{\frac{1}{2}}}{\hbar} = \frac{(m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}} 2^{\frac{1}{2}} \sqrt{E}}{\pi^2 \hbar^3} = A \sqrt{E} \quad (3.2.27)$$

бұдан

$$A = \frac{(m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}} \sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3}. \quad (3.2.28)$$

Осы (3.2.28) мен (3.2.18) теңдеулерді салыстырамыз:

$$\frac{2^{\frac{1}{2}} (m^*)^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} = \frac{(m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}} \sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3}, \quad (m^*)^{\frac{3}{2}} = (m_x m_y m_z)^{\frac{1}{2}},$$

$$m^* = (m_x m_y m_z)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.2.29)$$

(3.2.29)-дан электронның энергиясы эллипсоид тәрізді өзгергенде, масса құраушыларын күй тығыздығының эффективтілік массалары деп алуға болады.

Жалпы практикада Ферми бетін $N(E) = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int_S \frac{dS}{g}$ формула бойынша

анықтайды. \vec{k} толқындық векторлар аймағымен шектелетін $T=0$ кезде электрондармен толтырылған изоэнергетикалық бет Ферми беті деп аталады. Ферми бетіндегі күй тығыздығының теңдеуі

$$N(\xi_0) = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int_{S_F} \frac{dS}{g} \quad (3.2.30)$$

мұндағы S_F -Ферми бетінің ауданы.

Енді орташа мән теориясы бойынша (3.2.30) формуланы мынандай түрде жазуға болады:

$$N(\xi_0) = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \left(\frac{\bar{1}}{g} \right)_F S_F \quad (3.2.31)$$

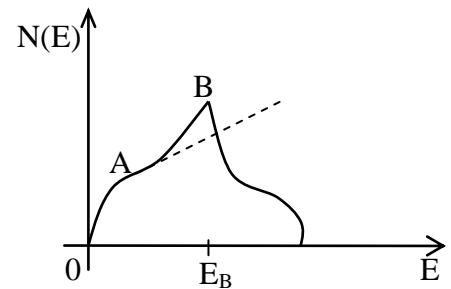
мұндағы $\left(\frac{\bar{1}}{g} \right)_F$ - Ферми бетіндегі $\frac{1}{g}$ орташа мәні.

Дисперсияның (3.2.13) квадраттық заңы жағдайында (3.2.17) және (3.2.20) формулалардан мына өрнекті аламыз

$$N(\xi_0) = \frac{3}{2} \frac{n}{\xi_0} \quad (3.2.32)$$

(3.2.31)-ден Ферми бетіндегі электрондардың орташа жылдамдығы азайған сайын S_F берілген мәнінде күй тығыздығы $N(\xi_0)$ артатындығы белгілі. \mathcal{V}_F шекаралық зоналарда мүлдем азайып кетеді. Сондықтан $N(E)$ зоналар шекараларында (3.2.32) тәуелділігінен айтарлықтай өзгеше болады.

20-суретте күй тығыздығының энергияға тәуелділігі сызба түрінде көрсетілген. E -нің аз мәнінде күй тығыздығы $N(E)$ еркін электронға қатысты (3.2.17) теңдеуіне тәуелді шамалы өзгешеленеді. Зона шекараларына жуықтау кезінде А нүктесінде $N(E)$ -нің (3.2.17)-де берілген мәндеріне қатысты артуы байқалады. Бұл арту электрондар жылдамдықтарының кемуіне негізделеді. В нүктесінде күй тығыздығы изоэнергетикалық бет зона шекарасына жеткен кезде максимумға ие болады. Ары қарай энергияның артуы кезінде $N(E)$ шамасы кемиді, демек изоэнергетикалық бет пен зона шекарасының беттесу ауданының артуымен зонаның бұрыштық көлеміндегі бос орындар саны кемиді.



20-сурет

$N(E)$ максимумына жуық кристалда қозғалатын электрондар энергиясы еркін электрондар энергиясынан төмен болады, демек кристалдарда берілген энергетикалық деңгейлерде E_B жақын жерде көп мөлшерде электрондар орналасады. Бұл зона шекарасына жақындаған кезде электрон энергиясы толқындық векторы сондай еркін электрондар энергиясынан аз болатындығымен сәйкес келеді. Электрондар энергиясының төмендеуі Ферми беті жоғары күй тығыздығын аймағында орналасқан кристалдық құрылымда таралуға икемді. Ферми бетінің түрін анықтауда әртүрлі әдістер қолданылады. Анығырақ мәліметтер де-Гааз-Ван-Альфен эффектiсi арқылы алынған. Бұл эффект төменгі температуралар аумағында байқалады. Ол $\frac{1}{H}$ шамасының өзгеруі кезіндегі магниттік қабылдағыштың осцилляциясында қолданылады. Қабылдағыш осцилляциясының периоды Ферми бетінің экстремалды қимасымен $S_j(\xi)$ тікелей байланысты

$$\Delta \left(\frac{1}{H} \right) = \frac{|e| \hbar}{c S_j(\xi)}. \quad (3.2.33)$$

Әртүрлі $\Delta\left(\frac{1}{H}\right)$ периодтарды өлшей отырып, Ферми бетінің әртүрлі экстремалды қимасын анықтауға болады. Магнит өрісі бағытының өзгеруімен периодтың өзгеретіндігін зерттей отырып, Ферми беті эллипстік немесе гиперболалық екендігін табуға болады. де- Гааз-Ван-Альфен эффектісі арқылы алынған эксперименттік мәліметтер 1-кестеде берілген.

1-кесте

Мырыш үшін Ферми бетінің қимасы, нм ⁻²		
Қималар	Еркін электрондар жуықтауы	Эксперимент
<i>a</i>	0,030	0,015
<i>b</i>	0,46	0,25
<i>c</i>	1,45	0,43
<i>d</i>	6,0	4,26
<i>e</i>	7,9	6,1
<i>f</i>	25	22

3.3 Металдардың өткізгіштік теориясы

Металдардың жоғарғы электр өткізгіштік қасиеті электрондық теория қағидасы бойынша электрондардың өзара оң зарядталған иондар аралығында қозғалуына негізделген.

Металдардың классикалық электрондық теориясы (Друде-1900 ж., Лоренц-1905 ж.) металдарда классикалық статистикаға бағынатын бос электрондар газы болады деп қарастырады. Сыртқы электр өрісі жоқ кезде металдағы электрондар ретсіз жылулық қозғалыста болады Сыртқы электр өрісі бар кезде электрондардың жылулық қозғалысымен қатар электр тогын туғызатын электрондардың бағытталған қозғалысы пайда болады. Иондармен соқтығыса отырып электрондар иондарға сыртқы электр өрісі әсерінен алған кинетикалық энергиясын береді. Соның салдарынан металл қызады. Осындай классикалық электрондық теорияның қағидалары бойынша Ом, Джоуль-Ленц, Видеман-Франц заңдарын түсіндіруге және Холл тұрақтысын анықтауға болады.

Ом заңы. Электрондардың қозғалысына негізделген электр тогының тығыздығы Лоренц формуласы бойынша былай анықталады

$$j_x = ne\bar{v}_x, \quad (3.3.1)$$

мұндағы n -электрондар концентрациясы, \bar{v}_x - электрондар жылдамдықтарының x осіне проекциясының орташа мәні, осы ось бойымен сыртқы электр өрісі кернеулігі \vec{E} бағытталады.

Ньютонның екінші заңына сәйкес

$$m \frac{d\vartheta_x}{dt} = eE_x = F_x, \quad (3.3.2)$$

мұндағы F_x - күштің x осіне проекциясы. Жылдамдықтың орташа мәнін түсіну

үшін интеграл аламыз: $\int_{\vartheta_{0,x}}^{\vartheta_x} d\vartheta_x = \frac{e}{m} E_x \int_0^t dt$. Егер E_x уақытқа тәуелсіз болса, онда

(3.3.2)-ден мынадай өрнек аламыз

$$\mathcal{G}_x = \mathcal{G}_{x,0} + \frac{e}{m} \varepsilon_x t \quad (3.3.3)$$

мұндағы $\mathcal{G}_{x,0}$ - электронның x осі бойынша бастапқы жылдамдығы. Бұл жылдамдық (кезекті соқтығысудан соң) x осі бойынша бірдей ықтималдылықпен оң және теріс проекцияларға ие болады. Сондықтан $\bar{\mathcal{G}}_{x,0}$ орташа мәні нөлге тең.

Электрондардың еркін жүруінің орташа уақыты τ болсын. Уақыт бойынша \mathcal{G}_x жылдамдық проекциясының орташа мәні екі соқтығысу арасында мына өрнекпен анықталады

$$\bar{\mathcal{G}}_x = \frac{e}{m} \varepsilon_x \left(\frac{1}{\tau} \right) \int_0^{\tau} t dt = \frac{e}{m} \varepsilon_x \left(\frac{1}{\tau} \right) \frac{\tau^2}{2} = \frac{e\tau}{2m} \varepsilon_x = \mu \varepsilon_x, \quad (3.3.4)$$

мұндағы μ - электрондардың қозғалғыштық коэффициенті, оның формуласы

$$\mu = \frac{e\tau}{2m}. \quad (3.3.5)$$

(3.3.1) және (3.3.4) формулалардан

$$j_x = ne\mu \varepsilon_x = \lambda \varepsilon_x, \quad (3.3.6)$$

мұндағы λ - электр өткізгіштік коэффициенті және ол (3.3.5) және (3.3.6) формулалар бойынша мынаған тең

$$\lambda = ne\mu_x = \frac{ne^2}{2m} \tau. \quad (3.3.7)$$

Классикалық статистика бойынша газ бөлшектерінің жылулық қозғалысының орташа жылдамдығы мына өрнекпен анықталады

$$u = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}. \quad (3.3.8)$$

Осы өрнектен массасы $m \sim 9 \cdot 10^{-28}$ г еркін электрон үшін $T \sim 300$ К температурада жылдамдықтың орташа мәні анықтауға болады: $u \sim 10^7$ см/с.

1) Егер де сыртқы электр өрісі кернеулігінің мәні өте аз болса, онда электрондардың бағытталған қозғалысының жылдамдығы \mathcal{G}_x жылулық қозғалыс жылдамдығынан u өте аз болады. Бұл жағдайда τ уақыты негізінен электрондардың жылулық қозғалыс жылдамдығымен анықталады:

$$\tau = \frac{l}{u}, \quad (3.3.9)$$

мұндағы l - электронның еркін жүру жолының ұзындығы. Олай болса, (3.3.5) өрнек былай жазылады

$$\mu = \frac{e}{2m} \frac{l}{u}. \quad (3.3.10)$$

Бұл формуланы (3.3.4)-ке қоямыз

$$\bar{\mathcal{G}}_x = \frac{e}{2m} \frac{l}{u} \varepsilon_x. \quad (3.3.11)$$

(3.3.9)-ды (3.3.7) формулаға қоямыз

$$\lambda = \frac{ne^2}{2m} \frac{l}{u}. \quad (3.3.12)$$

(3.3.12) өрнектің оң жағы электр өрісінің кернеулігіне тәуелсіз. Сондықтан (3.3.6) өрнекті электр өткізгіштік коэффициентті Ом заңы деп қарастыруға болады. (3.3.12) өрнекке λ -нің эксперименталды мәндерін қоя отырып, электронның металдағы еркін жүру жолы l ұзындығының орташа мәнін есептеуге болады.

(3.3.12) өрнекке (3.3.8)-ді қойсақ, онда

$$\lambda = \frac{ne^2 l}{2m u} = \frac{ne^2 l \sqrt{\pi m}}{2m \sqrt{8k \sqrt{T}}}. \quad (3.3.13)$$

Осыдан $\lambda \sim \frac{ne^2}{\sqrt{T}}$ екені белгілі. Мұндай теорияның экспериментпен қайшы келуін классикалық теория түсіндіре алмайды.

2) Электр өрісі күшті болған жағдайда екі соқтығысу уақыты бағытталған электрондардың жылдамдығымен анықталады, себебі күшті электр өрісі жағдайында электрондардың бағытталған қозғалысы жылулық қозғалыстан үлкен. Осы кезде Ом заңынан ауытқы пайда болуы мүмкін. (3.3.4) өрнекке сәйкес ε_x шамасының артуымен \bar{g}_x артады. $\bar{g}_x \gg u$ болғанда соқтығысу арасындағы уақыт \bar{g}_x шамасымен анықталады және (3.3.9) өрнегінің орнына мынадай теңдік орындалады

$$\tau = \frac{l}{\bar{g}_x}. \quad (3.3.14)$$

(3.3.14) және (3.3.5) формулалардан

$$\mu = \frac{e}{2m} \frac{l}{\bar{g}_x}. \quad (3.3.15)$$

(3.3.15)-ті (3.3.14) формулаға қоямыз, сонда

$$\bar{g}_x = \sqrt{\frac{el}{2m}} \sqrt{\varepsilon_x}. \quad (3.3.16)$$

Осыдан және (3.3.1) өрнектен мына теңдеуді аламыз

$$j_x = ne \sqrt{\frac{el}{2m}} \sqrt{\varepsilon_x}. \quad (3.3.17)$$

Олай болса, (3.3.17) өрнекке сәйкес (3.3.6) өрнектегі Ом заңынан айырмашылығы ток тығыздығы электр өрісінің кернеулігі күшті болған кезде $\sqrt{\varepsilon_x}$ шамасына пропорционал болады.

Джоуль-Ленц заңы. Джоуль-Ленц заңы Ом заңымен тығыз байланысты. (3.3.3) өрнекке сәйкес электрон еркін жүру жолының соңында кинетикалық энергияға ие болады, яғни

$$\frac{m g_x^2}{2} = \left(g_{x0} + \frac{e}{m} \varepsilon_x \tau \right)^2 \frac{m}{2}. \quad (3.3.18)$$

Соқтығысу нәтижесінде электронның ионға беретін энергиясы (3.3.18) өрнектегі кинетикалық энергия мен электронның $\frac{1}{2} m g_{x0}^2$ бастапқы кинетикалық энергиясының айырмасымен анықталады

$$\Delta E = \frac{m}{2} \left[\left(\mathcal{G}_{x,0} + \frac{e}{m} \varepsilon_x \tau \right)^2 - \mathcal{G}_{x,0}^2 \right] = \frac{m}{2} \left[\mathcal{G}_{x,0}^2 + \frac{2e}{m} \varepsilon_x \tau \mathcal{G}_{x,0} + \frac{e^2}{m^2} \varepsilon_x^2 \tau^2 - \mathcal{G}_{x,0}^2 \right] = e \varepsilon_x \tau \mathcal{G}_{x,0} + \frac{e^2}{2m} \varepsilon_x^2 \tau^2 . \quad (3.3.19)$$

Егер $\mathcal{G}_{x,0} = 0$ болса, онда $\Delta E = \frac{e^2}{2m} \varepsilon_x^2 \tau^2$.

Егер де бірлік көлемде n ион бар десек, онда сол бірлік көлемдегі иондарға берілетін энергия мынаған тең

$$\Delta E_n = n \Delta E = \frac{ne^2}{2m} \varepsilon_x^2 \tau^2 . \quad (3.3.20)$$

Бір өлшем уақытқа бөлсек, онда бірлік көлемдегі n иондарға бір өлшем уақытта берілетін (жылуды) энергияны - жылу мөлшерін есептейміз

$$Q = \frac{ne^2}{2m} \varepsilon_x^2 \tau = \lambda \varepsilon_x^2 . \quad (3.3.21)$$

(3.3.21) өрнек Джоуль-Ленц заңы деп аталады.

Видеман-Франц заңы. Классикалық теория бойынша газдың жылу өткізгіштік коэффициенті мынаған тең

$$\chi = \frac{1}{2} n u k_B l , \quad (3.3.22)$$

мұндағы n - газдың концентрациясы, u - газ молекулаларының орташа жылулық жылдамдығы, k_B - Больцман тұрақтысы, l - еркін жүру жолының орташа ұзындығы.

Металдар үшін классикалық электрондық теориядағы n , u , l электрондардың концентрациясы, орташа жылулық жылдамдығы, еркін жүру жолының ұзындығы. (3.3.22) және (3.3.12) өрнектерден

$$\frac{\chi}{\lambda} = \frac{u^2}{e^2} k_B m . \quad (3.3.23)$$

Осыдан (3.3.8) формуланы ескеріп, аламыз

$$\frac{\chi}{\lambda} \approx 3 \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T . \quad (3.3.24)$$

(3.3.24) өрнек Видеман-Франц заңы деп аталады. Барлық металдар үшін $\frac{\chi}{\lambda}$ қатынасы бірдей температурада тұрақты шама.

Классикалық электрондық теория Видеман-Франц заңының тек қана сапалық түсініктемесін бермейді, сонымен бірге бөлме температурасындағы экспериментпен сандық сәйкестікті береді. (3.3.24) өрнек бойынша Лоренц саны L тұрақты шама болып табылады

$$L = \frac{\chi}{\lambda T} \approx 3 \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 . \quad (3.3.25)$$

(3.3.25) өрнекке k_B және e мәндерін қоя отырып, Лоренц санының теориялық мәнін аламыз $L_{\text{теор}} = 2,45 \cdot 10^{-8}$ Вт·Ом/К. Лоренц санының теориялық және эксперименттік нәтижелері бірдей болады.

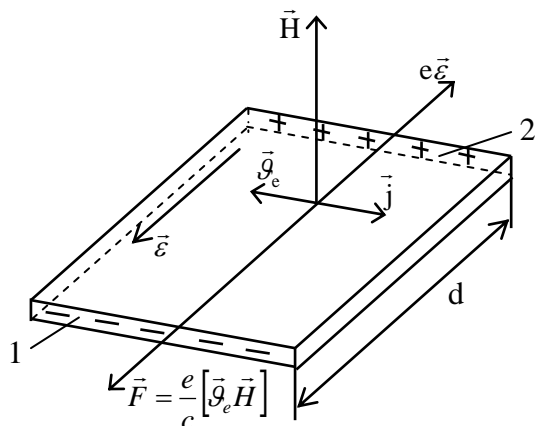
Видеман-Франц заңы жоғарғы температура үшін орындалады. Төменгі температурада жылу сыйымдылығы сияқты кванттық теория тұрғысынан қарауға тура келеді.

Холл эффектісі. Егер тығыздығы \vec{j} электр тогы сыртқы біртекті тұрақты магнит өрісіне \vec{H} перпендикуляр орналасқан пластинка бойымен өтетін болса, онда \vec{j} және \vec{H} -қа перпендикуляр бағытта пластинканың екі қапталында потенциалдар айырымы пайда болады, өйткені пластинканың екі қапталы конденсатор астарлары сияқты оң және теріс зарядтармен зарядталады. Потенциалдар айырымы мынаған тең

$$\Delta\varphi = RjHd, \quad (3.3.26)$$

мұндағы R - Холл тұрақтысы, d - пластинканың ені.

21-суретте электрондық өткізгіштік жағдайындағы Холл эффектісінің пайда болуы көрсетілген. Электрондардың заряды теріс болғандықтан ($e < 0$), олардың бағытталған қозғалысының жылдамдығы \vec{j} ток тығыздығына қарама қарсы бағытталған. Кернеулігі \vec{H} магнит өрісінде $\vec{\mathcal{G}}_e$ жылдамдықпен қозғалатын электронға Лоренц күші әсер етеді



21-сурет

$$\vec{F}_L = \frac{e}{c} [\vec{v}_d \vec{H}], \quad (3.3.27)$$

осы күш 1 бүйір жаққа қарай бағытталған. Сондықтан 1 жақ теріс, ал 2 жақ оң зарядталады. Бұл электр өрісінің пайда

болуына әкеледі. (3.3.27) өрнектегі Лоренц күшінің әсері 1 жақтан 2 жаққа қарай бағытталған $e\vec{\mathcal{E}}$ электр күшімен теңескенде бүйір жақтардағы зарядтардың өзгеруі тоқтайды. Сонда

$$e\mathcal{E} = \frac{e}{c} \mathcal{G}_l H, \quad (3.3.28)$$

осыдан және (3.3.1) өрнектен аламыз

$$\mathcal{E} = \frac{1}{nec} jH. \quad (3.3.29)$$

(3.3.29) өрнектің екі жағын да d -ға көбейте отырып, потенциалдар айырымын аламыз

$$\Delta\varphi = \mathcal{E}d = \frac{1}{nec} jHd. \quad (3.3.30)$$

(3.3.30) және (3.3.26) өрнектерін салыстыру Холл эффектісі үшін келесі теңдеуге әкеледі

$$R = \frac{1}{nec}. \quad (3.3.31)$$

Классикалық электрондық теорияның жеткіліксіздігі. (3.3.12) және (3.3.8) өрнектерге сәйкес электр өткізгіштік $\frac{nl}{\sqrt{T}}$ шамасына пропорционал.

Тәжірибе бөлме температурасында $\lambda \sim \frac{1}{T}$ екендігін көрсетеді. Сондықтан λ -нің температуралық тәуелділігін алу үшін $nl \sim \frac{1}{\sqrt{T}}$ деп қарастыру қажет.

Бірақ классикалық теория мұндай тәуелділікті негіздей алмайды.

Классикалық электрондық теория барлық температураларда (3.3.24) өрнектегі Видеман-Франц заңын қарастырады. Ал тәжірибе төменгі температураларда (3.3.24) Видеман-Франц заңы орындалмайтынын көрсетеді.

Классикалық электрондық теория кейбір металдарда Холл тұрақтысы оң мән қабылдайтынын түсіндіре алмайды.

3.4 Металдар өткізгіштігінің кванттық теориясы

Кванттық электрондық теория бойынша электр тогының тығыздығы (3.3.1) өрнекке сәйкес мына формуламен анықталады

$$j = e \int \mathcal{G}_x f_\varepsilon d\Phi, \quad (3.4.1)$$

мұндағы f_ε -сыртқы электр өрісінің болуымен электрондардың таралу функциясы, $d\Phi$ - күй функциясы

$$d\Phi = \frac{2}{(2\pi)^3} d\vec{k}. \quad (3.4.2)$$

2 көбейткіші спиннің екі мүмкін проекциясын көрсетеді.

(3.3.2)-ге сәйкес

$$\hbar \dot{\vec{k}} = e\vec{\varepsilon} - \frac{\hbar}{\tau}(\vec{k} - \vec{k}_0), \quad (3.4.3)$$

мұндағы $e\vec{\varepsilon}$ - электр өрісінің кернеулігі $\vec{\varepsilon}$ болған кезде электронға әсер етуші күш, $-\frac{\hbar}{\tau}(\vec{k} - \vec{k}_0)$ - соқтығысулар кезіндегі үйкеліс күші, \vec{k}_0 - бұл $\vec{\varepsilon}=0$ болғандағы \vec{k} -ға тепе-тең мән. Шынында да, $\vec{\varepsilon}=0$ болғанда (3.4.3) өрнектен мынадай теңдеу шығады

$$\frac{dk_x}{k_x - k_{0,x}} = -\frac{dt}{\tau}. \quad (3.4.4)$$

Уақыт бойынша интегралдай отырып, (3.4.4) өрнектен аламыз

$$k_x(t) - k_{0,x} = [k_x(0) - k_{0,x}] e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (3.4.5)$$

Осыған ұқсас теңдеулер y және z осьтері үшін де алынады. Осы өрнектен $\frac{t}{\tau} \gg 1$ болған кезде $\vec{k}(t)$ векторының экспоненциалды түрде \vec{k}_0 векторына ұмтылатындығы белгілі.

Тұрақты ток жағдайында $\dot{\vec{k}}$ орташа мәні нөлге тең, сондықтан (3.4.3) өрнектен аламыз

$$\delta\vec{k} = (\vec{k} - \vec{k}_0) = \frac{\tau}{\hbar} e\vec{\varepsilon}, \quad (3.4.6)$$

яғни энергия сан мәні $\delta\mathcal{E}$ өсімшеге өзгереді. Сондықтан электрондардың таралу функциясын мына түрде іздестіреміз

$$f_\varepsilon(E) = f(E - \delta E), \quad (3.4.7)$$

δE өте аз өсімше болғандықтан (3.4.7)-ні қатарға жіктейміз

$$f_\varepsilon(E) = f(E - \delta E) = f(E) - \frac{\partial f}{\partial E} \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \delta k_x + \frac{\partial E}{\partial k_y} \delta k_y + \frac{\partial E}{\partial k_z} \delta k_z \right). \quad (3.4.8)$$

(3.4.8), (3.4.6) өрнектерінен шығатыны

$$f_{\varepsilon}(E) = f(E) - \frac{\partial f}{\partial E} \tau e[\bar{g}\bar{\varepsilon}]. \quad (3.4.9)$$

(3.4.8) формуланы (3.4.1) формулаға қоямыз, сонда

$$j_x = e \int \vartheta_x f(E) d\Phi + e^2 \int \tau \vartheta_x (\bar{g}\bar{\varepsilon}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) d\Phi. \quad (3.4.10)$$

(3.4.10) теңдеудің оң жағындағы бірінші мүше нөлге тең, өйткені $\vartheta_x f(E)$ көбейтіндісі тақ. Сонда

$$j_x = e^2 \int \tau \vartheta_x (\bar{g}\bar{\varepsilon}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) d\Phi. \quad (3.4.11)$$

$d\Phi$ функциясын бөлек қарастырамыз:

$$\Phi = \frac{1}{4\pi^3} \int_V dk = \frac{1}{4\pi^3} \int_S dk dS = \frac{1}{4\pi^3} \int_{SE} \frac{dk}{dE} dS dE = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int_{SE} \frac{dS dE}{g}. \quad (3.4.12)$$

Онда (3.4.11) өрнек бойынша мына өрнекті аламыз

$$\vec{j} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_{SE} \tau \bar{g}(\bar{g}\bar{\varepsilon}) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) \frac{dS}{g} dE. \quad (3.4.13)$$

(3.2.4) өрнекке сәйкес туынды аламыз

$$-\frac{\partial f}{\partial E} = \frac{e^{\frac{E-\xi}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{E-\xi}{k_B T}} + 1 \right)^2} \frac{1}{k_B T}. \quad (3.4.14)$$

$E = \xi$ болғанда $f(E) = 1$. Сондықтан (3.4.13) өрнекті былай жазамыз

$$\vec{j} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \int_{S_F} \tau \frac{\bar{g}(\bar{g}\bar{\varepsilon})}{g} dS_F, \quad (3.4.15)$$

мұндағы интегралдау Ферми беттігі бойынша болады.

4 ЗАТТЫҢ МАГНИТТІК ҚАСИЕТТЕРІ

4.1 Диамагнетизмнің классикалық теориясы

Диамагнетиктердің классикалық теория бойынша магниттік момент (\vec{M}) пен магнит өрісінің кернеулігі (\vec{H}) арасындағы байланыс мынадай:

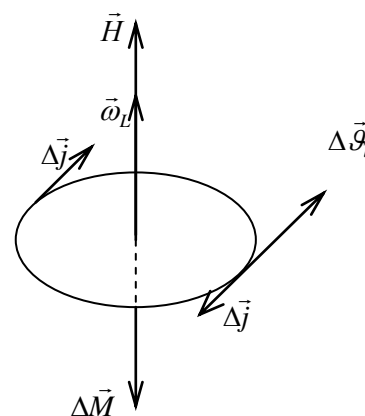
$$\vec{M} = \chi_d \vec{H}, \quad (4.1.1)$$

мұндағы $\chi_d < 0$. Диамагниттік қабылдағыштықтың теріс болуы \vec{M} -нің \vec{H} -қа қарама-қарсы бағытталауын көрсетеді. Диамагнетиктерге инертті газдар, металдардың (мыс, күміс, алтын, бериллий, мырыш, сынап, бор, галлий, кадмий, индий, қорғасын, висмут және т.б.), жартылай өткізгіштердің және қосылыстардың (бензол, антрацен және т.б) бірқатары жатады.

Классикалық теорияға сәйкес диамагнетизм құбылысының себебі сыртқы магнит өрісінде индукцияланған электрондардың айналуы болып табылады. Осы айнарудың бұрыштық жылдамдығы Лармор теориясымен анықталады (1897ж).

$$\vec{\omega}_L = -\frac{e}{2mc} \vec{H}. \quad (4.1.2)$$

Өйткені электрон үшін $e < 0$, онда (4.1.2) өрнектен $\omega_L \uparrow \vec{H}$ екені шығады. Сондықтан электрондардың қосымша айналу жылдамдығы $\Delta \vec{\vartheta}$, \vec{H} -пен оң бұрғы түзейді (22-сурет). Индукцияланған токтың бағыты (яғни оң зарядтардың бағыты) \vec{H} -пен сол бұрғы құрайды. Магниттік момент дөңгелек токпен оң бұрғы жүйесін құрайтындықтан индукцияланған магниттік момент $\Delta \vec{M}$ \vec{H} -қа қарсы бағытталады, бұл диамагнетизмге әкеледі.



22-сурет

Электрондардың қосымша айналуына негізделген (4.1.2) магниттелуді есептеу үшін магниттік момент $\vec{\mu}$ пен қозғалыс мөлшерінің моменті \vec{K} арасындағы қатынасты қолданамыз:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{K}. \quad (4.1.3)$$

Дөңгелек орбита үшін $\vec{r} \perp \vec{\vartheta}$ және $\vartheta = \omega r$ болғанда, $K = m r \vartheta$. Сондықтан (4.1.3)-тен шығатыны

$$\mu = \frac{e r^2}{2c} \omega. \quad (4.1.4)$$

(4.1.4) және (4.1.2)-ден индукцияланатын магнит моменті

$$\mu = -\frac{e^2 r^2}{4mc^2} H. \quad (4.1.5)$$

z осін \vec{H} бойымен бағыттайық. Сонда $r^2 = x^2 + y^2$, және (4.1.5)-тен мынадай өрнек аламыз:

$$\mu = -\frac{e^2 (x^2 + y^2)}{4mc^2} H. \quad (4.1.6)$$

Z электроны бар атомның магниттік моменті мына өрнекпен анықталады:

$$\mu = -\frac{e^2}{4mc^2} H \sum_{k=1}^Z (x_k^2 + y_k^2) = -\frac{Ze^2}{4mc^2} (\overline{x^2} + \overline{y^2}) H . \quad (4.1.7)$$

мұндағы: $\overline{x^2}$ және $\overline{y^2}$ - x^2 пен y^2 -тың орта мәндері.

Егер атомдағы электрондардың таралуы сфералық симметриялы болып табылса, онда $\overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2} = \frac{1}{3} a^2$ (мұндағы a^2 - электронның атом центрінен қашықтығы квадратының орташа мәні) теңдігі орындалады. Осыдан (4.1.7) теңдеуі былай өрнектеледі:

$$\mu = -\frac{Ze^2 a^2}{6mc^2} H . \quad (4.1.8)$$

(4.1.8) өрнекті бірлік көлемдегі атомдардың N санына көбейте отырып, магниттелу үшін өрнек аламыз:

$$\mu = -\frac{NZe^2 a^2}{6mc^2} H . \quad (4.1.9)$$

(4.1.9) және (4.1.1) өрнектерінен диамагниттік қабылдағыштық үшін Ланжевен формуласы (Паули түзетуі ескерілген) алынады:

$$\chi_d = -\frac{NZe^2 a^2}{6mc^2} . \quad (4.1.10)$$

(4.1.10) өрнектегі N -нің орнына N_A Авогадро тұрақтысын және m , c , e орындарына олардың сан мәндерін қойып, мольдік магниттік қабылдағыштықты анықтаймыз:

$$\chi_{d,M} = -2,832 \cdot 10^{10} \frac{cM}{\text{моль}} Z a^2 . \quad (4.1.11)$$

4.2 Диамагнетизмнің кванттық теориясы

Диамагнетиктердің классикалық теориясы атомдарда болатын электрондардың стационар орбитасының болатындығын ескермейді. Сондықтан диамагниттік қасиетті кванттық теория тұрғысынан қарастырамыз. Кванттық механика бойынша магнит өрісіндегі электрлік ток тығыздығы мына формуламен жазылады:

$$\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2m} (\psi \text{grad} \psi^* - \psi^* \text{grad} \psi) - \frac{e^2}{mc} \vec{A} |\psi|^2 , \quad (4.2.1)$$

мұндағы: \vec{A} - потенциал-вектор. Енді толық магниттік моменттің өзгерісі:

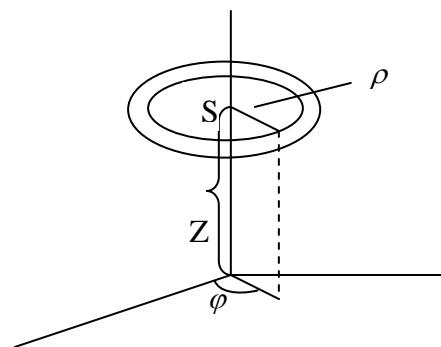
$$d\vec{M}_z = \frac{1}{c} dIS = \frac{1}{c} j_\varphi d\sigma \rho^2 , \quad (4.2.2)$$

мұндағы: $d\sigma$ және S - 23-суретте көрсетілген аудандар, ρ , φ , z - цилиндрлік жүйенің координаттары. $2\pi\rho d\sigma = dV$ (мұндағы dV - радиусы ρ және қимасы $d\sigma$ түтіктің көлемі) екеніні ескеріп, (4.2.2)-ті мына түрде жазамыз:

$$d\vec{M}_z = \frac{1}{2c} j_\varphi \rho dV . \quad (4.2.3)$$

(4.2.1) және (4.2.3)-тен шығатыны:

$$M_z = \frac{ie\hbar}{4mc} \int \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \varphi} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) dV - \frac{e^2}{2mc^2} \int A_\varphi |\psi|^2 \rho dV .$$



23-сурет

(4.2.4)

Кванттық механика бойынша

$$M_{z,1} = \frac{ie\hbar}{4mcv} \int \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \varphi} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) dV$$

шамасы сутегітәріздес атом жағдайында сыртқы магнит өрісінің кернеулігіне тәуелсіз магниттік момент болып табылады:

$$M_{z,1} = m\mu_B, \quad (4.2.5)$$

мұндағы: m - магниттік кванттық сан, μ_B - Бор магнетоны.

$$M_{z,2} = -\frac{e^2}{2mc^2} \int A_\varphi |\psi|^2 \rho dV, \quad (4.2.6)$$

өрнегіне қатысты, бұл магнит моменті потенциал-векторға анық тәуелді. z осін біртекті тұрақты магнит өрісінің \vec{H} кернеулігі бойымен бағыттасақ, онда:

$$A_\varphi = \frac{1}{2} H \rho, \quad A_\rho = A_z = 0. \quad (4.2.7)$$

Одан шығатыны:

$$M_{z,2} = -\frac{e^2}{4mc^2} H \int \rho^2 |\psi|^2 dV. \quad (4.2.8)$$

(4.2.8) формуланың оң жағындағы интеграл $\overline{\rho^2}$ орташа мәні болып табылады. Сондықтан

$$M_{z,2} = -\frac{e^2 \overline{\rho^2}}{4mc^2} H, \quad (4.2.9)$$

ал $Z=1$ болғанда (4.1.5) өрнегімен сәйкес келеді. Олай болса, кванттық теорияға сәйкес атомның диамагнетизмі потенциал-векторға тәуелді болатын (4.2.1) ток тығыздығының екінші бөлігіне негізделеді.

4.3 Парамагнетиктер және олардың классикалық теориясы

Парамагнетиктердегі магнит моменті M мен магнит өрісінің кернеулігі H арасындағы байланыс:

$$\vec{M} = \chi_p \vec{H}, \quad (4.3.1)$$

мұндағы: $\chi_p > 0$. Парамагниттік қабылдағыштықтың оң таңбасы парамагнетиктерде магниттік момент сыртқы магнит өрісі кернеулігінің бойымен бағытталатындығын білдіреді. Парамагнетиктерге атомдары немесе молекулалары сыртқы магнит өрісі болмағанда магниттік моментке ие болатын кәдімгі заттар жатады. Мұндай дайын магниттік моменттер мысалы, толық спині нөлге тең емес электрондарының саны тақ болатын атомдарда және молекулаларда болады (11 электроны бар натрий атомы, 15 элеткроны бар азот қышқылы және т.б.). сонымен бірге сілтілі металдар, молекулалық оттегі, бірқатар қосылыстар парамагнетиктер болып табылады. Көптеген парамагнетиктерде магниттік қабылдағыштық температураға күшті тәуелді болып келеді. Бірақ сілтілі металдарда магниттік қабылдағыштық температураға ешқандай байланыссыз болады. Белгілі бір жағдайларда поляризациялық парамагнетизм де температураға тәуелсіз болып табылады.

1895 жылы П. Кюри газ тәріздес оттегінің парамагниттік коэффициенті (қабылдағыштығы) абсолют температураға кері пропорционал екендігін тағайындады:

$$\chi_p = \frac{C}{T}, \quad (4.3.2)$$

мұндағы: C - Кюри тұрақтысы. 1905 жылы Ланжевен парамагниттік қабылдағыштықтың классикалық теориясын тағайындады. Бұл теория Кюри заңын (4.3.2) алуға және Кюри тұрақтысының микроқұрылымын анықтауға мүмкіндік береді.

N бөлшектердің M магниттелуі мен F еркін энергия арасындағы байланыс:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H}. \quad (4.3.3)$$

Мұндағы

$$F = -Nk_B T \ln Z, \quad (4.3.4)$$

$$Z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}. \quad (4.3.5)$$

Кернеулігі \vec{H} сыртқы магнит өрісінде орналасқан магниттік моменті $\vec{\mu}$ бөлшектік U потенциалдық энергиясы мына өрнекпен анықталады:

$$U = -(\vec{\mu}\vec{H}) = -\mu H \cos \theta, \quad (4.3.6)$$

мұндағы: θ - $\vec{\mu}$ және \vec{H} бағыттары арасындағы бұрыш. (4.3.6) формуладағы энергияны (4.3.5)-ке E_i -дің орнына қоямыз:

$$Z = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} e^{-\frac{\mu H \cos \theta}{k_B T}} \sin \theta d\theta. \quad (4.3.7)$$

$$a = \frac{\mu H}{k_B T}, \quad x = \cos \theta$$

белгілеулерін енгіземіз, сонда:

$$Z = 2\pi \int_0^{\pi} e^{-\frac{\mu H \cos \theta}{k_B T}} d(\cos \theta) = 2\pi \int_{-1}^1 e^{ax} dx = \frac{2\pi}{a} (e^a - e^{-a}) = \frac{4\pi}{a} sha. \quad (4.3.8)$$

(4.3.8) және (4.3.4) өрнектерінен толық магниттік моментті аламыз:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = Nk_B T \frac{\partial}{\partial H} \left[\ln \frac{4\pi}{a} sha \right] = Nk_B T \frac{a}{4\pi sha} \left[-\frac{4\pi}{a^2} sha + sha \frac{4\pi}{a} \right] = Nk_B T \left[-\frac{1}{a} + ctha \right] \frac{\partial a}{\partial H}. \quad (4.3.9)$$

$\frac{\partial a}{\partial H} = \frac{\mu}{k_B T}$ болғандықтан (4.3.9) өрнектен

$$M = N\mu L(a), \quad (4.3.10)$$

мұндағы:

$$L(a) = ctha - \frac{1}{a} \quad (4.3.11)$$

- Ленжевен функциясы деп аталады.

Егер $a \ll 1$, $ctha \approx \frac{1}{a} + \frac{a}{3}$ болса, (4.3.11) шығатыны

$$L(a)|_{a \ll 1} \approx \frac{a}{3} \quad (4.3.12)$$

(4.3.12) формулаға сәйкес

$$M = N\mu \frac{a}{3} = \frac{N\mu^2}{3k_B T} \bar{H}. \quad (4.3.13)$$

Бұдан және (4.3.1)-ден

$$\chi_p = \frac{N\mu^2}{3k_B T}. \quad (4.3.14)$$

Бұл

$$C = \frac{N\mu^2}{3k_B} \quad (4.3.15)$$

болғанда Кюри заңымен (4.3.2) дәл келеді.

4.4 Парамагнетизмнің кванттық теориясы

Парамагнетиктердің кванттық теориясы бойынша парамагнетиктердің қасиеті магниттік кванттық сан арқылы түсіндіріледі: $m_j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, (2j + 1)$. Сол уақытта магнит моменті мынаған тең:

$$\mu_z = g_j m_j \mu_B. \quad (4.4.1)$$

(4.4.1) және (4.3.6) өрнектерінен мынаны аламыз

$$U_{mj} = -(\vec{\mu}\vec{H}) = \mu H \cos\theta = -\mu_z H = -g_j m_j \mu_B H. \quad (4.4.2)$$

мұндағы: $\mu_z = \mu \cos\theta$

U_{mj} мәнін (4.3.5) формуладағы E_i орнына қоямыз:

$$Z = \sum_{m_j=-j}^j e^{\frac{g_j m_j \mu_B H}{k_B T}}. \quad (4.4.3)$$

$$\alpha = \frac{g_j \mu_B H}{k_B T} \quad (4.4.4)$$

белгілеуін енгіземіз. Геометриялық прогрессияға арналған формуланы қолдана отырып, (4.4.3)-тен мына өрнекті аламыз

$$Z = \sum_{m_j=-j}^j e^{m_j \alpha} = \frac{\text{sh}\left(j + \frac{1}{2}\right)\alpha}{\text{sh}\frac{\alpha}{2}}. \quad (4.4.5)$$

Осыдан және (4.3.4) формулалардан

$$F = -Nk_B T \ln \frac{\text{sh}\left(j + \frac{1}{2}\right)\alpha}{\text{sh}\frac{\alpha}{2}}. \quad (4.4.6)$$

(4.4.6) және (4.4.3) өрнектерден мынадай формула аламыз:

$$M = Nk_B T \frac{\text{sh}\frac{\alpha}{2}}{\text{sh}\left(j + \frac{1}{2}\right)\alpha} \frac{\left(j + \frac{1}{2}\right) \text{ch}\left(j + \frac{1}{2}\right)\alpha \text{sh}\frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2} \text{ch}\frac{\alpha}{2} \text{sh}\left(j + \frac{1}{2}\right)\alpha}{\text{sh}^2\frac{\alpha}{2}} \frac{\partial a}{\partial H}. \quad (4.4.7)$$

(4.4.4)-ке сәйкес

$$\frac{\partial a}{\partial H} = \frac{g_j \mu_B}{k_B T}.$$

Сондықтан (4.4.7)-ден

$$M = Ng_j \mu_B \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \text{cth} \left(j + \frac{1}{2} \right) \alpha - \frac{1}{2} \text{cth} \frac{\alpha}{2} \right] = Ng_j \mu_B j B_j(a), \quad (4.4.8)$$

мұндағы: $a = j\alpha = \frac{jg_j \mu_B H}{k_B T}$.

$$B_j(a) = \frac{2j+1}{2j} \text{cth} \frac{2j+1}{2j} a - \frac{1}{2j} \text{cth} \frac{a}{2j} \quad (4.4.9)$$

- Бриллюэн функциясы деп аталады.

Егер $a \ll 1$ болса, $\text{cth} a \approx \frac{1}{a} + \frac{a}{3}$, онда

$$B_j(a) \approx \frac{(j+1)a}{j} \frac{1}{3}. \quad (4.4.10)$$

(4.4.10), (4.4.8) формулаларды ескере отырып, мынадай өрнек аламыз

$$\bar{M} = \frac{Ng_i^2 M_B^2}{3k_B T} j(j+1)H. \quad (4.4.11)$$

(4.4.11) формуласын (4.3.1) формуламен салыстырсақ:

$$\chi_p = \frac{Ng_i^2 M_B^2}{3k_B T} j(j+1) \quad (4.4.12)$$

Ал (4.3.14) өрнегімен салыстыру $a \ll 1$ болғанда Ланжевэн функциясы мен Бриллюэн функциясы Кюри заңына әкелетінін көрсетеді.

4.5 Ферромагнетизм

Вейсстің молекулалық өрісі. Ферромагнетиктер (темір, ковальт, гадолиний және т.б. қоспалар мен қосылыстардың бірқатары) жеткілікті төменгі температурада өз еркімен магниттелу қасиетіне ие. 1907 жылы Вейсс ферромагнетиктердің негізгі қасиеттерін сипаттау үшін молекулалық өріс туралы ұғымды қолданды.

Вейсс бойынша ферромагнетикте атомның магниттік моментіне кернеулігі

$H_{эфф}$

$$H_{эфф} = H + bM \quad (4.5.1)$$

(мұндағы: M -ферромагнетиктердің магниттелуі, b -Вейс тұрақтысы) теңдігімен анықталатын эффективті магнит өрісі әсер етеді. Ферромагнетиктің магниттелуі

$$M = N\mu L(a), \quad (4.5.2)$$

Бұдан

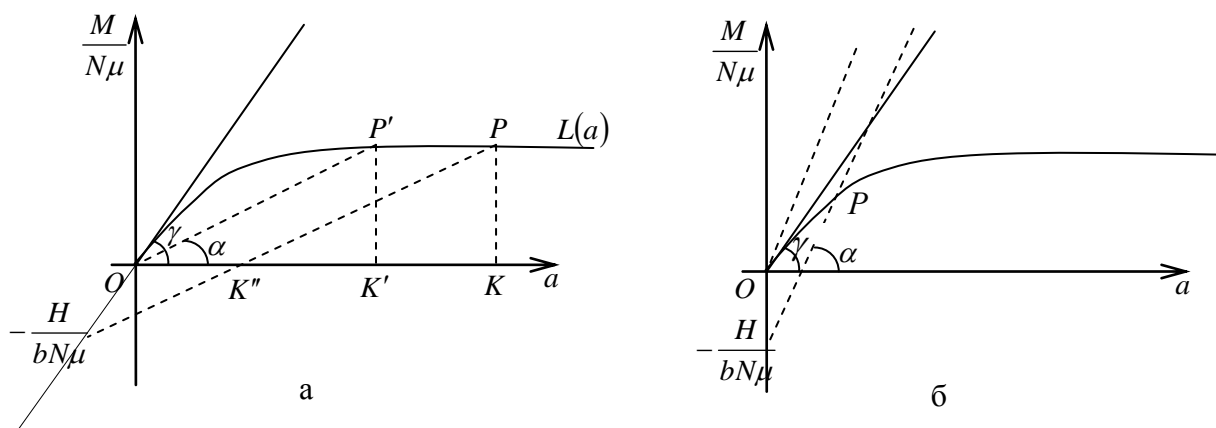
$$\frac{M}{N\mu} = L(a). \quad (4.5.3)$$

(4.5.1) формуладан:

$$M = \frac{H_{эфф} - H}{b} \quad (4.5.4)$$

$$L(a) = \frac{M}{N\mu} = \frac{H_{эфф} - H}{N\mu b} = \frac{k_B T}{N\mu^2 b} a - \frac{H}{N\mu b}. \quad (4.5.5)$$

Сондықтан $\frac{M}{N\mu}$ мәнін (4.5.3)-тегі $L(a)$ қисығы мен (4.5.5) түзуі қиылысатын P нүктесінің ординатасы ретінде графиктік жолмен анықтауға болады. P нүктесі және оған сәйкес ордината КР 24а-суретте көрсетілген. Бұл суретте (4.5.5)-ке



24-сурет

сәйкес түзу $a=0$ болғанда ординатаны $-\frac{H}{bN\mu}$ нүктеде қияды және абсцисса осіне α бұрыш орналасады. Осы бұрыш мынаған тең

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{k_B T}{Nb\mu^2}. \quad (4.5.6)$$

24а-суретте сонымен бірге $a=0$ нүктесіндегі Ланжевен қисығына жанама да көрсетілген. Бұл жанаманың абсцисса осіне көлбеу γ бұрышының тангансі $\frac{1}{3}$ -ке тең. 24а-сурет $\alpha < \gamma$ жағдайына сәйкес келеді. Бұл кезде

$$\operatorname{tg} \alpha < \operatorname{tg} \gamma. \quad (4.5.7)$$

Бұл теңсіздікке (4.5.6)-дағы $\operatorname{tg} \alpha$ мәнін және $\operatorname{tg} \gamma = \frac{1}{3}$ мәндерін қойсақ, онда

$$T < \frac{Nb\mu^2}{3k_B}. \quad (4.5.8)$$

Егер (4.5.8), (4.5.7) өрнектері орындалса, $T = \text{const}$ (α бұрышының белгілі мәнінде) және $H \rightarrow 0$ болса, онда 24а-суреттегі $K''P$ түзуі OP' күйіне өтеді, ал KP кесіндісі $K'P'$ кесіндісіне өтеді, Ал $\frac{M}{N\mu}$ -дің шамасы азаяды, бірақ нөлден өзгеше болады. Сонымен (4.5.8) өрнекті қанағаттандыратын температуралар аумағында магниттелу магнит өрісін айырғанда жоғалмайды, яғни зат өздігінен магниттелу қасиетіне ие болады және ферромагнетик болып табылады

Кюри температурасы. Енді жоғарғы температура аумағын қарастырайық, яғни

$$T > \frac{Nb\mu^2}{3k_B}. \quad (4.5.9)$$

Онда (4.5.7) өрнек былай болады

$$\operatorname{tg} \alpha > \operatorname{tg} \gamma, \quad (4.5.10)$$

яғни $\alpha > \gamma$. Бұл жағдай 24б-суретте көрсетілген. Онда $H \rightarrow 0$ болғанда P нүктесі және сәйкесінше магниттелу нөлге ұмтылады. Сондықтан (4.5.9)-ды қанағаттандыратын температуралар аумағында зат өздігінен магниттелу қасиетіне ие болмайды және парамагнетик болып табылады.

(4.5.8) және (4.5.9) өрнектерінен

$$T_k = \frac{Nb\mu^2}{3k_B} \quad (4.5.11)$$

Кюри нүктесінің мәні шығады: $T < T_k$ болғанда, зат ферромагнетик, ал $T > T_k$ болғанда зат парамагнетик болып табылады.

Кюри нүктесінен жоғары нүктеде, яғни $\alpha < 1$ болғанда, магниттелу өрнегін былай жазуға болады.

$$M = \frac{\frac{N\mu^2}{3k_B}}{T - \frac{N\mu^2 b}{3k_B}} H = \chi H. \quad (4.5.12)$$

Олай болса, Кюри нүктесінен жоғары нүктеде магниттелудің магнит өрісінің кернеулігіне тәуелділігі, парамагнетиктердегі сияқты, сызықтық болып табылады. Бірақ кәдімгі парамагнетиктерден өзгешелігі температуралық тәуелділік Кюри заңымен емес, Кюри-Вейсс заңымен анықталады

$$\chi = \frac{C}{T - T_k}. \quad (4.5.13)$$

Пайдаланған әдебиеттер.

1. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. М., 1978
2. Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики.
3. М.С. Сверхский электронная теория вещества М. «прос-е» 1980
4. Ансельм А.И. Основы статической физики и термодинамики М., 1973.
5. Арцимович Л.А. Управляемые термоядерные реакции. М., 1963
6. Арцимович Л.А. Что каждый физики должен знать о плазме. М., 1976
7. Жирифалько Л. Статическая физика. Қатты дене статистикалық физикасы. М., 1975
8. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М., 1976
9. Иоффе А.Т. Физика полупроводников. М., 1957.
10. Ландау Л.Д., Лифшид Е. М. Статистическая физика. М., 1964
11. Лендъел Б. Лазеры М., 1964
12. Спитцер Л. Физика полностью ионизированного газа М., 1965
13. Шалимова К.В. Физика полупроводников. М., 1971.

Мазмұны:

1	Қатты денелердің зоналық теориясы.....	4
1.1	Қатты денелердегі атомдардың байланысу түрлері.....	4
1.2	Кристалл торының геометриясы	5
1.3	Кристалдық тордың периодтық өрісіндегі электронның қозғалысы.....	8
1.4	Блохтың толқындық функциясы және квазиимпульс.....	11
1.5	Атомдық энергетикалық деңгейлердің бөлінуі және энергетикалық аймақтардың құрылуы	12
1.6	Металдар, жартылай өткізгіштер және диэлектриктер.....	15
2	Кристалдық тор динамикасы.....	18
2.1	Кристалдық тор тербелісінің классикалық теориясы.....	18
2.2	Кристалдық тор тербелісінің кванттық теориясы.....	21
2.3	Квазибөлшек әдісі. Фонондар.....	23
2.4	Қатты денелердің жоғарғы және төменгі температуралардағы жылу сыйымдылығы.....	24
3	Металдағы электрондық газ.....	28
3.1	Квазиимпульстің дисперсия заңы және эффектілік масса әдісі.....	28
3.2	Ферми беті.....	30
3.3	Металдардың өткізгіштік теориясы.....	35
3.4	Металдар өткізгіштігінің кванттық теориясы.....	40
4	Заттың магниттік қасиеттері.....	42
4.1	Диамагнетизмнің классикалық теориясы.....	42
4.2	Диамагнетизмнің кванттық теориясы.....	43
4.3	Парамагнетиктер және олардың классикалық теориясы.....	44
4.4	Парамагнетизмнің кванттық теориясы.....	46
4.5	Ферромагнетизм.....	47
	Пайдаланған әдебиеттер	49

Пішімі 60x84 1/12
Көлемі 51 бет 4,25 шартты баспа табағы
Таралымы 20 дана.
Ш.Есенов атындағы КМТЖИУ
Редакциялық - баспа бөлімінде басылды.
Ақтау қаласы, 32 ш/а.