

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Ильшат Ринатович Мухаметзянов

Должность: директор

Дата подписания: 13.07.2023 15:15:48

Уникальный идентификатор документа: aba80b84033c9ef196388e9ea0434f90a83a40954ba270e84bcb664f02d1d8d0

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Казанский национальный исследовательский

технический

университет им. А.Н. Туполева-КАИ»

Чистопольский филиал «Восток»

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К ПРАКТИЧЕСКИМ ЗАНЯТИЯМ

по дисциплине

«ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУЧЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ»

Индекс по учебному плану: **Б1.В.03**

Направление подготовки: **38.03.01 Экономика**

Квалификация: **Бакалавр**

Профиль подготовки: **Экономика малого и среднего предпринимательства**

Вид профессиональной деятельности: **расчетно-экономический,
организационно-управленческий, научно-исследовательский**

Чистополь

2023 г.

1.1 Волновые свойства микрочастиц. Соотношение неопределенностей.

С точки зрения классической физики, движение частиц и распространение волн – суть два разных процесса. Первый управляется законами ньютоновской механики, а второй – уравнениями максвелловской электродинамики. Разделение материи на частицы и волны привело к тому, что классическая физика не смогла объяснить две группы явлений: взаимодействие света с веществом и существование устойчивых атомов. Поэтому была создана новая квантовая физика.

Известно, что свет, проявляет как волновые (интерференция, дифракция), так и корпускулярные свойства (тепловое излучение, фотоэффект), поэтому говорят о «корпускулярно–волновом дуализме» света. С другой стороны, существование устойчивых атомов обязано квантованию электронных орбит (постулаты Бора).

В 1923-1924 гг. Луи де Бройль пришел к заключению, что если свет обладает и волновыми, и корпускулярными свойствами (фотоны), то и обычные частицы (электроны, протоны) могут обладать кроме корпускулярных, еще и волновыми свойствами. Согласно де Бройлю, любой микрочастице с импульсом p и энергией E можно поставить в соответствие волну длиной λ и частотой ν

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu}, \quad \nu = \frac{E}{h}, \quad (1.1)$$

где $h = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, m – масса частицы, ν – ее скорость.

Соотношения де Бройля часто записывают в виде:

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad (1.2)$$

где $\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с, $\omega = 2\pi\nu$ – циклическая частота, и \mathbf{k} – волновой вектор, указывающий направление распространения и длину волны, соответствующей частице ($k = 2\pi/\lambda$).

Так как длина волны де Бройля обратно пропорциональна массе частицы, то у макроскопических тел волновые свойства практически не проявляются. Действительно, пылинка массой 10^{-6} кг, движущаяся со скоростью 10 м/с, характеризуется очень малой длиной волны де Бройля $\lambda = 6,6 \cdot 10^{-29}$ м.

Опытное подтверждение гипотезы де Бройля о существовании волновых свойств у частиц вещества было получено в опытах Девиссона и Джермера, изучавших отражение (дифракцию) электронов от поверхности кристаллов (рис.1). В этих опытах было установлено, что при изменении угла падения электронов данной скорости, отражение имеет резко выраженный максимум при углах падения, удовлетворяющих условию Вульфа – Брегга, полученному ранее для отражения рентгеновских лучей от кристаллов:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (1.3)$$

где d – расстояние между атомными плоскостями кристалла, θ – угол скольжения, определяющий направление электронного пучка, в котором имеет место дифракционный максимум (зеркальное отражение), n – порядковый номер этого максимума, λ – длина волны де Бройля электрона.

Позднее дифракцию наблюдали и для более тяжелых заряженных частиц – протонов, ионов гелия и др., а также и для нейтральных атомов, причем соотношение (1.3) хорошо подтверждалось.

Физическая суть квантовой теории следует из соотношений неопределенностей Гейзенберга (СНГ):

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar; \quad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar; \quad \Delta z \Delta p_z \geq \hbar; \quad (1.4)$$

где Δx , Δy , Δz и Δp_x , Δp_y , Δp_z – неопределенности в значениях координат и компонент импульса частицы.

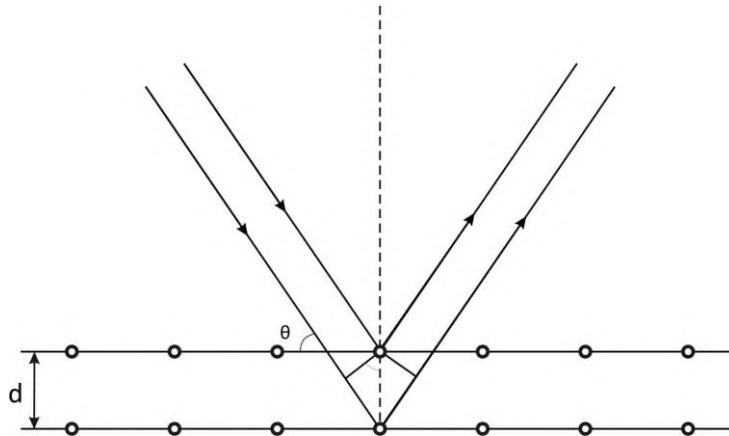


Рис. 1. Отражение (дифракция) электронов от поверхности кристаллов

Таким образом, чем точнее можно определить координаты частицы ($\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$), тем неопределеннее становится ее импульс ($\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z \rightarrow \infty$) и наоборот. Соотношение неопределенностей характеризует границы применимости классических представлений к микропроцессам. Поскольку теряется определенность понятий координаты и импульса, классическое описание движения оказывается невозможным, поэтому понятие траектории частицы в квантовой механике отсутствует.

Соотношение, связывающее неопределенность энергии ΔE микрочастицы и отрезок времени Δt , в течение которого эта неопределенность существует, имеет вид

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (1.5)$$

Примеры решения задач

Задача 1. Какую ускоряющую разность потенциалов U должен пройти электрон, чтобы длина соответствующей волны де Бройля λ равнялась 5 \AA .

Решение

По прохождении разности потенциалов U вся потенциальная энергия электрона

$E_{\text{пот}} = eU$ переходит в кинетическую $E_{\text{кин}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$. Следовательно, в соответствии с законом сохранения энергии имеем

$$eU = \frac{p^2}{2m}. \quad (1)$$

Длина волны де Бройля λ связана с импульсом p электрона соотношением

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (2)$$

Выражая из (2) импульс p и подставляя в (1), получим

$$U = \frac{h^2}{2m\lambda^2 e}.$$

Подставляя значения физических величин, получим

$$U = \frac{(6,63)^2 \cdot 10^{-68}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 25 \cdot 10^{-20} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \text{ В} = 6 \text{ В}.$$

Ответ: $U = 6 \text{ В}$.

Задача 2. Кинетическая энергия электрона на первой боровской орбите в атоме водорода равна 13,6 эВ. Используя соотношение неопределенностей, оценить минимальные линейные размеры атома.

Решение

Пусть атом водорода имеет линейные размеры L . Тогда неопределенность координаты электрона в пределах атома $\Delta x = L/2$ (относительно ядра). Из соотношения неопределенностей Гейзенберга $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ следует, что

$$L \geq \frac{2\hbar}{\Delta p}. \quad (1)$$

Далее, кинетическая энергия электрона в атоме водорода может быть определена соотношением

$$E_k = \frac{p^2}{2m}. \quad (2)$$

Очевидно, что неопределенность в импульсе Δp не должна превышать значения самого импульса p , т.е. $\Delta p \leq p$. Следовательно, из (2) получаем

$$\Delta p \leq \sqrt{2mE_k}. \quad (3)$$

Сопоставляя теперь (1) и (3) видим, что минимальный линейный размер атома равен

$$L_{\min} = \frac{2\hbar}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{2 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 13,6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \text{ м} = 1,05 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Для сравнения приведем табличное значение диаметра первой боровской орбиты $d = 1,06 \text{ \AA}$. Видно, что метод ШГ дает достаточно близкую оценку размеров атома.

Ответ: $L_{\min} = 1,05 \cdot 10^{-10} \text{ м}$.

Задача 3. На грань кристалла никеля падает параллельный пучок электронов. В процессе эксперимента кристалл поворачивают и, когда угол скольжения становится равным 64° , наблюдается дифракционный максимум первого порядка. Зная, что скорость электронов $v = 2 \cdot 10^6 \text{ м/с}$, определить расстояние между атомными плоскостями никеля и сравнить его с длиной волны электронов.

Решение

Из соотношений де Бройля следует, что длина волны электронов

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}.$$

Подставляя табличные данные, получим

$$\lambda = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 2 \cdot 10^6} = 3,7 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 3,7 \text{ \AA}.$$

С другой стороны, исходя из уравнения Вульфа – Брегга

$$d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta},$$

при $n=1$ и $\theta=64^\circ$ получим $d = 2 \text{ \AA}$.

Ответ: из сравнения видно, что длина волны электрона соизмерима с межплоскостным расстоянием $d = 2 \text{ \AA}$. Поэтому и возможна дифракция электронных волн на кристаллической решетке.

Задачи для самостоятельного решения.

- 1.1. Определить длины волн де Бройля соответственно для электрона, протона и пылинки массой 1 мг, разогнанных до скорости 10^6 м/с. Исходя из этого объяснить, почему в окружающем нас макроскопическом мире волновые свойства тел не проявляются.
- 1.2. Найти длину волны де Бройля электрона, прошедшего ускоряющую разность потенциалов $\Delta\varphi = 1$ кВ.
- 1.3. Электрон движется по круговой орбите радиусом $r = 1$ см в однородном магнитном поле с индукцией $B = 4$ Тл, найти длину волны де Бройля электрона.
- 1.4. При увеличении кинетической энергии электрона на 200 эВ его де бройлевская длина волны изменилась в два раза. Найти первоначальную длину волны электрона.
- 1.5. Оценить неопределенность скорости электрона в атоме водорода, полагая, что размер атома порядка 10^{-8} см. Сравнить полученное значение со скоростью электрона на первой боровской орбите.
- 1.6. Исходя из соотношения неопределенностей, оценить минимальную энергию электрона в атоме водорода и соответствующее расстояние от ядра.
- 1.7. Электрон с кинетической энергией $E_k = 4$ эВ локализован в области размером $L = 10$ нм. Оценить с помощью соотношения неопределенностей относительную неопределенность $\Delta v/v$ его скорости.
- 1.8. С помощью соотношения неопределенностей оценить минимальную энергию электронов в атоме гелия и их расстояние от ядра.
- 1.9. Частица массой m движется в одномерном потенциальном поле $U(x) = \alpha x^2/2$ (гармонический осциллятор с частотой $\omega = \sqrt{\alpha/m}$). Оценить минимальную возможную энергию этой частицы.
- 1.10. Оценить, во сколько раз неопределенность координаты частицы больше ее де бройлевской длины волны, если относительная неопределенность кинетической энергии этой частицы порядка $1,6 \cdot 10^{-4}$.
- 1.11. Пучок электронов с кинетической энергией $E_k = 180$ эВ падает нормально на поверхность монокристалла никеля. В направлении, составляющем угол $\alpha = 55^\circ$ с нормалью к поверхности, наблюдается максимум отражения четвертого порядка. Найти межплоскостное расстояние, соответствующее этому отражению.
- 1.12. Узкий пучок моноэнергетических электронов падает под углом скольжения $\theta = 30^\circ$ на естественную грань монокристалла алюминия. Расстояние между соседними кристаллическими плоскостями, параллельными этой грани монокристалла, $d = 0,2$ нм. При некотором ускоряющем напряжении U_0 наблюдали дифракционный максимум отраженного пучка. Найти U_0 , если известно, что следующий максимум зеркального отражения возникал при ускоряющем напряжении $U = 2,25 U_0$.

1.2 Волновое уравнение Шредингера.

Статистическое толкование волн де Бройля и соотношения неопределенностей Гейзенберга (см.1.1) привели к выводу, что уравнением движения в квантовой механике, описывающем движение микрочастиц в различных силовых полях, должно быть уравнение, из которого бы вытекали наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц. Основное уравнение должно быть уравнением относительно волновой функции $\Psi(x, y, z, t) = \Psi(\mathbf{r}, t)$

$$\rho = dw/dV = |\Psi|^2, \quad (1.6)$$

квадрат модуля которой есть плотность вероятности обнаружить частицу в момент времени t в точке $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Такое уравнение было найдено Э. Шредингером в 1926 г. Оно имеет следующий вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\mathbf{r}, t) \cdot \Psi, \quad (1.7)$$

где $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа, а $U(\mathbf{r}, t)$ – потенциальная энергия частицы.

Для многих физических явлений, происходящих в микромире, уравнение (1.7) можно упростить, исключив зависимость Ψ от времени, иными словами, найти уравнение Шредингера для стационарных состояний – состояний с фиксированными значениями энергии. Это возможно, если силовое поле, в котором частица движется, стационарно, т.е. функция $U = U(\mathbf{r})$ не зависит явно от времени. В данном случае решение уравнение Шредингера может быть представлено в виде произведения двух функций $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{r})$, где амплитуда волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ удовлетворяет стационарному или амплитудному уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\mathbf{r}) \psi = E \psi, \quad (1.8)$$

E – разрешенные значения энергии, а $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ – плотность вероятности обнаружить частицу в состоянии с данной энергией. В простейшем случае одномерного движения вдоль оси x $\Psi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \Psi(x, t)$, $U(\mathbf{r}, t) \Rightarrow U(x, t)$,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t) \Psi. \quad (1.9)$$

В стационарном случае $U(x, t) = U(x)$; $\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$ и амплитудное уравнение имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi = E \psi. \quad (1.10)$$

Вероятность обнаружить частицу в интервале от x_1 до x_2 есть

$$w = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi|^2 dx. \quad (1.11)$$

Среднее значение любой физической величины $B(x)$ на этом интервале есть

$$\langle B \rangle = \frac{\int_{x_1}^{x_2} B(x) |\Psi(x)|^2 dx}{\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx}. \quad (1.12)$$

Применения уравнения Шредингера

1. Движение свободной частицы ($U(x) = 0$) описывается волновой функцией

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)}, \quad (1.13)$$

где $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число, $\omega = E/\hbar$ – циклическая частота, $\varphi = kx - \omega t$ – фаза волны. Связь энергии с волновым числом k определяется законом дисперсии

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.14)$$

- Фазовая скорость – это скорость движения участка волны с данной фазой

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k}. \quad (1.15)$$

- Групповая скорость – это скорость перемещения волнового пакета (скорость переноса волной энергии)

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (1.16)$$

В случае свободной частицы с учетом формул (1.15) и (1.16) получаем $v_f = \frac{v}{2}$ и

$v_g = v$, где v - скорость частицы.

2. Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер.

а) Бесконечный потенциальный барьер (ступенька), см. рис. 2 (а).

В случае низкого барьера $E > U$, волновые числа k_1 и k_2 в областях $U(x) = 0$ и $U(x) = U$, соответственно, равны

$$k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \quad k_2 = \left(\frac{2m(E-U)}{\hbar^2} \right)^{1/2}. \quad (1.17)$$

Коэффициент преломления волн при переходе границы раздела

$$n = \frac{k_2}{k_1}. \quad (1.18)$$

Коэффициент отражения R от границы раздела

$$R = \left[\frac{(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)} \right]^2. \quad (1.19)$$

Коэффициент прохождения (прозрачности) границы раздела

$$D = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (1.20)$$

Связь между коэффициентами прохождения и отражения $R + D = 1$.

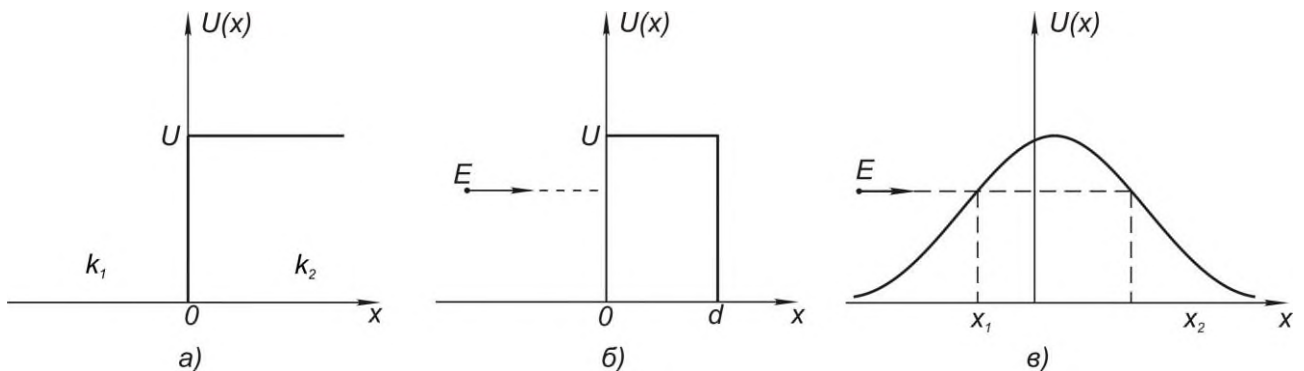


Рис. 2. Потенциальные барьеры: а) полубесконечный (ступенька); б) прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины; в) барьер произвольной формы.

б) Прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины, рис. 2 (б).

В случае высокого барьера $E < U$ коэффициент прозрачности

$$D \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)}d \right], \quad (1.21)$$

где d – ширина барьера, U – его высота, E – энергия частицы.

в) Барьер произвольной формы, см. рис. 2 (в).

$$D \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x)-E)} dx \right], \quad (1.22)$$

где x_1 и x_2 – точки, между которыми $E < U(x)$, являются корнями уравнения $U(x) = E$.

3. Микрочастица в прямоугольной потенциальной яме.

Движение микрочастицы в прямоугольной потенциальной яме характеризуется дискретным набором разрешенных значений (уровней энергии)

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}, \quad (1.23)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

Соответствующие вероятности занятия этих уровней энергии определяются собственными функциями уравнения Шредингера

$$\psi_n = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{\pi n x}{L} \right), \quad (1.24)$$

$n = 1$ – основное состояние, $n = 2, 3, 4, \dots$ – возбужденные состояния.

4. Линейный гармонический осциллятор.

Частица, совершающая одномерные гармонические колебания около положения равновесия, называется линейным гармоническим осциллятором (ЛГО).

Частота колебаний ЛГО $\omega = \sqrt{\frac{f}{m}}$, где f – константа упругой силы, m – масса

частицы.

Потенциальная энергия ЛГО

$$U = \frac{fx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (1.25)$$

Собственные значения уравнения Шредингера, т.е. разрешенные значения (уровней) энергии

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.26)$$

Собственные функции уравнения Шредингера

$$\psi_n = \left(2^n \sqrt{\pi n!} \right)^{-1/2} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \text{где } \xi = x \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2}, \quad (1.27)$$

где H_n – полиномы Эрмита; $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ – энергия нулевых колебаний – основное состояние.

ЛГО имеет эквидистантный спектр колебаний с расстоянием между соседними уровнями $\Delta E_{n+1,n} = \hbar\omega$, т.е. испускание и поглощение излучения осциллятором происходит квантами величиной $\hbar\omega$.

Примеры решения задач

Задача 1. Определить высоту потенциального барьера U (причем $E > U$), если 10% электронов с энергией $E = 10$ эВ отражается при падении на этот барьер.

Решение

Коэффициент отражения то низкого потенциального барьера $E > U$:

$$R = \left[\frac{(k_1 - k_2)}{(k_1 + k_2)} \right]^2 = \left[\frac{(1 - \sqrt{1 - U/E})}{(1 + \sqrt{1 - U/E})} \right]^2 = \frac{(1 - x)^2}{(1 + x)^2},$$

$$x = \frac{(1 - \sqrt{R})}{(1 + \sqrt{R})},$$

$$\sqrt{R} = \sqrt{0,01} = 0,316,$$

$$U = \left[1 - \frac{(1 - \sqrt{R})^2}{(1 + \sqrt{R})^2} \right] \cdot E = \frac{4E\sqrt{R}}{(1 + \sqrt{R})^2} = 7,3 \text{ эВ.}$$

Ответ: $U = 7,3$ эВ.

Задача 2. При ширине d прямоугольного потенциального барьера коэффициент прозрачности D для электронов равен 0,01. Разность энергий $U - E = 10$ эВ.

Решение

Вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер равна

$$D = \exp \left[-\frac{2d}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(U - E)} \right],$$

$$\ln D = -\frac{2d}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)},$$

$$d = \frac{\hbar \ln \left(\frac{1}{D} \right)}{2\sqrt{2m(U - E)}} = 1,35 \cdot 10^{-10} \text{ м.}$$

Ответ: $d = 1,35 \cdot 10^{-10}$ м.

Задача 3. Электрон заключен в бесконечно глубокую потенциальную яму шириной L . Найти вероятность обнаружения электрона, находящегося в возбужденном состоянии с $n = 3$, в первой четверти ямы.

Решение

Волновая функция n -го состояния есть

$$\Psi_n = \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{\pi n x}{L} \right).$$

Вероятность нахождения электрона на уровне E_n в интервале от x_1 до x_2 дается формулой

$$w_n = \int_{x_1}^{x_2} |\Psi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{L} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2(\pi x n/L) dx.$$

$$w_3\left(0, \frac{L}{4}\right) = \frac{2}{L} \int_0^{\frac{L}{4}} \sin^2\left(\frac{3\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{L} \int_0^{\frac{L}{4}} \left[1 - \cos\left(\frac{6\pi x}{L}\right)\right] dx = \frac{1}{L} \left[x - \frac{L}{6\pi} \sin\left(\frac{6\pi x}{L}\right) \right]_0^{\frac{L}{4}} = 0,3.$$

Ответ: $w_3\left(0, \frac{L}{4}\right) = 0,3.$

Задача 4. Определить частоту колебаний линейного гармонического осциллятора, если амплитуда колебаний равна 0,400 нм, масса частицы $m = 10^{-27}$ кг, $n = 1$.

Решение

Энергия колебаний ЛГО

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

С другой стороны, в отклоненном состоянии вся энергия осциллятора потенциальная

$$U = \frac{m\omega^2 a^2}{2},$$

где a – амплитуда колебаний. Приравнявая значения энергий, получим частоту колебаний линейного гармонического осциллятора

$$\frac{m\omega^2 a^2}{2} = \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega,$$

$$\omega = \frac{3\hbar}{ma^2} = \frac{3 \cdot 10^{-34}}{10^{-27} \cdot 16 \cdot 10^{-20}} = 2 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}.$$

Ответ: $\omega = 2 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}.$

Задачи для самостоятельного решения.

- 2.1 Электрон с энергией 100 эВ попадает на потенциальный барьер высотой $U = 84$ эВ. Определить вероятность того, что электрон отразится от барьера.
- 2.2 Найти приближенное выражение для коэффициентов отражения R и прохождения D в случае очень низкого потенциального барьера ($U \ll E$).
- 2.3 Поток электронов с энергией 100 эВ падает на низкий прямоугольный потенциальный барьер бесконечной ширины. Определить высоту барьера, если известно, что коэффициент прозрачности барьера равен 0,7.
- 2.4 Коэффициент прохождения электронов через низкий потенциальный барьер равен коэффициенту отражения. Найти отношение высоты барьера U к энергии электрона E .
- 2.5 При каком отношении высоты U и потенциального барьера к энергии E электрона, падающего на барьер, показатель преломления n волн де Бройля и коэффициент отражения R численно равны.
- 2.6 Вывести формулу, связывающую коэффициент прохождения электронов через потенциальный барьер и коэффициент преломления волн де Бройля. Определить показатель преломления, если коэффициент прохождения $D = 0,8$.
- 2.7 Показать на примере низкого потенциального барьера ($U < E$), что полное число частиц N – сохраняется, т.е. что $N = N_R + N_D$, где N_R – число частиц, отразившихся от барьера, а N_D – число частиц, прошедших через барьер.

- 2.8 На низкий потенциальный барьер падает моноэнергетический поток электронов с плотностью потока энергии $J_1 = 10 \text{ Вт/м}^2$. Определить плотность потока энергии J_2 электронов, прошедших барьер, если его высота $U = 0,91 \text{ эВ}$ и энергия электронов в падающем потоке $E = 1 \text{ эВ}$.
- 2.9 Моноэнергетический поток электронов падает на низкий потенциальный барьер. Коэффициент прохождения $D = 0,9$. Определить отношение J_2/J_1 плотностей потоков энергии электронов, прошедших через барьер и на него падающих.
- 2.10 Электрон с энергией E падает на высокий прямоугольный потенциальный барьер шириной $d = 10 \text{ \AA}$. При каком значении $U - E$, выраженном в электронвольтах, коэффициент прозрачности $D = 0,001$.
- 2.11 Ширина d прямоугольного потенциального барьера равна 2 \AA . Разность энергий $U - E = 1 \text{ эВ}$. Во сколько раз изменится вероятность прохождения электрона через барьер, если разность энергий возрастет в 10 раз.
- 2.12 Протон и электрон прошли одинаковую ускоряющую разность потенциалов $\Delta\varphi = 1 \text{ кВ}$. Во сколько раз отличаются коэффициенты прозрачности D_e для электрона и D_p для протона, если высота барьера $U = 20 \text{ эВ}$, а его ширина $d = 0,1 \text{ \AA}$.
- 2.13 Воспользовавшись формулой для коэффициента прозрачности D в случае потенциального барьера произвольной формы, найти вероятность прохождения через барьер вида
- $$U(x) = \left(1 - \frac{|x|}{L}\right) U_0 \text{ для частицы массой } m \text{ и энергией } E, \text{ причем } E < U.$$
- 2.14 То же, что в предыдущей задаче, но потенциальный барьер имеет вид
- $$U(x) = U_0 \cdot \left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right).$$
- 2.15 Электрон заключен в бесконечно глубокую прямоугольную потенциальную яму шириной $L = 0,5 \text{ нм}$. Определить наименьшую разность ΔE энергетических уровней электрона. Ответ выразить в электронвольтах.
- 2.16 Для частицы в потенциальной яме найти отношение разности соседних энергетических уровней $\Delta E_{n+1,n} = \hbar\omega$, к энергии E_n частицы в случае: а) $n = 3$; б) $n = 10$; в) $n \rightarrow \infty$. Пояснить полученные результаты.
- 2.17 Собственная функция, описывающая состояние частицы в потенциальной яме имеет вид $\psi_n = C \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)$. Используя условие нормировки, определить постоянную C .
- 2.18 Частица в потенциальной яме находится в возбужденном состоянии с $n = 2$. Определить, в каких точках интервала ($0 < x < L$) плотность вероятности $|\psi_2(x)|^2$ нахождения частицы максимальна и минимальна.
- 2.19 Электрон заключен в потенциальную яму шириной L . В каких точках интервала ($0 < x < L$) плотность вероятности нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях одинакова. Вычислить плотность вероятности этих точек. Решение пояснить графически.
- 2.20 Частица в потенциальной яме находится в основном состоянии. Какова вероятность обнаружения частицы: а) в средней трети ямы, б) в крайней трети ямы.
- 2.21 Вычислить отношение вероятностей w_1/w_2 нахождения частицы на первом и втором энергетических уровнях в четверти интервала ($0, L$), равноудаленной от стенок одномерной потенциальной ямы.

- 2.22 Показать, что собственные функции $\psi_n(x)$ и $\psi_m(x)$, описывающие состояние частицы в потенциальной яме, удовлетворяют условию орто-нормированности:

$$\int_0^L \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & \text{при } n = m. \\ 0, & \text{при } n \neq m. \end{cases}$$

- 2.23 Определить среднее значение координаты $\langle x \rangle$ частицы в потенциальной яме шириной L , ($0 < x < L$).

- 2.24 Волновая функция основного состояния линейного гармонического осциллятора имеет вид $\psi_0 = A \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$, где $\xi = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$. Найти нормировочную постоянную A .

- 2.25 Найти наиболее вероятное значение координаты x , а также среднее значение $\langle x \rangle$ для линейного гармонического осциллятора в основном состоянии с $\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$, где $\xi = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x$.

- 2.26 Определить массу линейного гармонического осциллятора, если амплитуда колебаний $a = 0,035$ нм, энергия $E = 0,1$ эВ, $n = 2$.

1.3 Движение в поле центральных сил. Атом водорода.

Уравнение Шредингера, описывающее стационарные состояния электрона, движущегося в кулоновском поле ядра, имеет вид

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0, \quad (1.28)$$

где $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$ – амплитуда волновой функции электрона, E – его полная энергия, $U(r)$ – потенциальная энергия электрона, для водородоподобных систем она имеет вид

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1.29)$$

здесь Z – зарядовое число, e – заряд электрона, ϵ_0 – электрическая постоянная, r – расстояние от ядра. В случае атома водорода $Z = 1$.

При положительных значениях энергии ($E > 0$) электрон имеет сплошной энергетический спектр, соответствующий движению свободной частицы, налетающей на ядро и вновь удаляющейся на бесконечность.

При $E < 0$ электрон движется внутри сферически симметричной потенциальной ямы $U(r)$ и его энергия E квантуется. Разрешенные значения E_n образуют дискретный энергетический спектр

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{32\pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (1.30)$$

где n – главное квантовое число ($n = 1, 2, 3, \dots$).

Соответствующие E_n собственные функции Ψ_{nlm_l} , определяющие вероятность нахождения электрона в этих состояниях, распадаются на произведение радиальной $R_{nl}(r)$ и угловой $Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$ – частей

$$\Psi_{nlm_l}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi). \quad (1.31)$$

Здесь n – главное квантовое число ($n = 1, 2, 3, \dots$), l – орбитальное квантовое число ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$), m_l – магнитное квантовое число ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$). Задание этих трех квантовых чисел полностью определяет состояние электрона в атоме водорода.

Так как значения E_n не зависят от квантовых чисел l и m_l , то одному и тому же уровню E_n соответствует $\gamma = n^2$ состояний с различными l и m_l . Поэтому говорят, что уровень E_n n^2 – раз вырожден. В S – состоянии ($l = m_l = 0$) волновая функция электрона сферически симметрична (т.е. не зависит от углов ϑ и φ).

Нормированные собственные функции, соответствующие $1S$ – основному и $2S$ – возбужденному состояниям, определяются выражениями (1.32) и (1.33)

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}, \quad (1.32)$$

$$\Psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}, \quad (1.33)$$

где $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar}{me^2} = 0,53 \text{ \AA} = 0,053 \text{ нм}$ – боровский радиус.

Вероятность dw – обнаружить электрон в атоме водорода, находящемся в S – состоянии в шаровом слое $(r, r+dr)$, определяется формулой

$$dw_{n00} = |\Psi_{n00}(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr. \quad (1.34)$$

Полная вероятность обнаружения электрона в шаровом слое (r_1, r_2)

$$w_{n00}(r_1, r_2) = \int_{r_1}^{r_2} dw. \quad (1.35)$$

Среднее значение любой физической величины A по состоянию $n00$ определяется следующим образом

$$\langle A(r) \rangle_{n00} = \int_0^\infty A(r) \cdot dw. \quad (1.36)$$

Орбитальный момент количества движения определяется выражением

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (1.37)$$

где \mathbf{r} – радиус – вектор электрона, а \mathbf{p} – его импульс.

Орбитальный момент количества движения квантуется, т.е. принимает ряд дискретных значений. Из решения уравнения Шредингера следует, что

$$L = \hbar \cdot \sqrt{l(l+1)}. \quad (1.38)$$

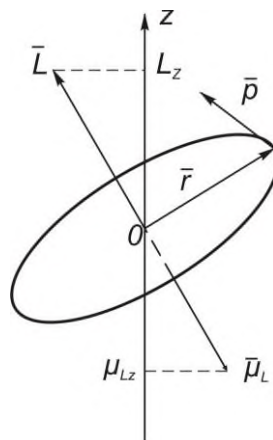


Рис.3. Орбитальный момент количества движения

Таким образом, орбитальное квантовое число l ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$) определяет величину орбитального момента импульса L . Существование максимального значения

орбитального квантового числа ($l_{\max} = n - 1$) означает, что при фиксированном значении полной энергии E_n кинетическая энергия вращательного движения ($\sim L^2$) не может быть больше E_n .

Проекция момента количества движения L на произвольную ось z (направление внешнего поля) может принимать лишь целочисленные значения в единицах \hbar :

$$L_z = \hbar m_l, \quad (1.39)$$

Магнитное квантовое число $m_l = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \pm l$ характеризует ориентацию вектора L относительно выбранной оси z (оси квантования).

Орбитальное движение электрона приводит к появлению также орбитального магнитного момента (рис. 3.)

$$\mu_L = -gL, \quad (1.40)$$

где $g = e/2m$ – гиромагнитное отношение. Величина орбитального магнитного момента μ_L и его проекция на ось z , т.е. μ_{Lz} , квантуются:

$$\mu_L = \mu_B \cdot \sqrt{l(l+1)}, \quad \mu_{Lz} = -\mu_B \cdot m_l. \quad (1.41)$$

Таким образом, приходим к выводу о том, что магнитные моменты атомов кратны некоторому элементарному магнитному моменту называемому магнетонем Бора.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл} \quad (1.42)$$

Кроме орбитального момента импульса и связанного с ним магнитного момента, электрон обладает также и собственным моментом импульса S или спиновым магнитным моментом μ_s .

$$\mu_s = -2gS. \quad (1.43)$$

Величина спина и его проекция на ось z кратны \hbar :

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}, \quad S_z = \hbar m_s, \quad (1.44)$$

где $m_s = -s, \dots, +s$ – спиновое квантовое число.

Для магнитного спинового момента справедливы соотношения:

$$\mu_s = 2\mu_B \cdot \sqrt{s(s+1)}, \quad \mu_s = -2m_s \cdot \mu_B. \quad (1.45)$$

Для электрона спин $s = 1/2$ и спиновое квантовое число m_s принимает два значения $m_s = \pm 1/2$.

В многоэлектронных атомах потенциал взаимодействия ядра с валентным электроном отличается от кулоновского

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{a}{r} - \frac{b}{r^2} - \dots \right), \quad (1.46)$$

из-за экранирующего действия более глубоких электронных оболочек.

Вследствие этого, вырождение уровней по l снимается и каждый уровень энергии характеризуется двумя квантовыми числами n и l : E_{nl} . Под действием внешнего магнитного поля E_{nl} , вырожденных по квантовым числам m_l и m_s (эффект Зеемана):

$$E_{nlm_l m_s} = E_{nl} + (m_l + 2m_s) \mu_B H \quad (1.47)$$

Таким образом, состояние электрона в атоме определяется заданием четверки квантовых чисел: n, l, m_l, m_s , а значит и соответствующих функций $\Psi_{n l m_l m_s}$ и

собственных значений энергии $E_{n l m_l m_s}$. Частицы с полуцелым спином $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

(электроны, протоны, нейтроны) называются *фермионами* и описываются антисимметричными волновыми функциями. Частицы с целым спином $S = 0, 1, 2, \dots$

(фотоны, фононы, π - и k -мезоны) называются *бозонами* и имеют симметричные волновые функции.

Для фермионов справедлив *принцип запрета Паули*: в системе одинаковых частиц с полужелым спином две или более частицы не могут одновременно занимать одинаковые состояния, т.е. состояния с одним и тем же набором квантовых чисел: n, l, m_l, m_s .

Классификация состояний в атоме.

По главному квантовому числу

По орбитальному квантовому числу

n	1	2	3	4
оболочка	K	L	M	N

l	0	1	2	3
орбиталь	s	p	d	f

Пр

имеры решения задач

Задача 1. Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислить вероятность того, что электрон находится внутри области, ограниченной сферой радиуса a (боровский радиус). Волновая функция электрона в основном состоянии

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}.$$

Решение

Вероятность обнаружить электрон в 1- s состоянии в шаровом слое от r до $r+dr$ дается выражением (3.7)

$$dw = |\Psi_{100}|^2 4\pi r^2 dr. \quad (1)$$

Тогда вероятность обнаружения электрона внутри сферы радиуса a есть

$$w(0, a) = \int_0^a |\Psi_{100}|^2 4\pi r^2 dr = \frac{4\pi}{\pi a^3} \int_0^a r^2 e^{-2r/a} dr. \quad (2)$$

После введения замены $x = \frac{r}{a}$, получим

$$w = 4 \int_0^1 x^2 e^{-2x} dx = 4 \left(-\frac{1}{e^2} - \frac{1}{4e^{2x}} \Big|_0^1 \right) = 4 \left(\frac{1}{4} - \frac{5}{4e^2} \right) = 1 - \frac{5}{e^2} = 1 - 0,677 = 0,323.$$

Ответ: $w = 0,323$.

Задача 2. Атом водорода, находившийся в основном состоянии, поглотил квант света с энергией $\varepsilon = 10,2$ эВ. Определить возможные значения момента импульса L , орбитального магнитного момента μ_L и их максимальных проекций на ось z электрона в возбужденном состоянии.

Решение

Уровни энергии электрона в атоме водорода даются выражением

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}. \quad (1)$$

Пусть электрон, поглотив квант света ε , перешел в возбужденное состояние E_n . Тогда главное квантовое число n этого состояния находится из уравнения

$$E_n - E_1 = \varepsilon. \quad (2)$$

Или

$$\frac{E_1}{n^2} = E_1 + \varepsilon.$$

Откуда

$$n = \sqrt{\frac{E_1}{(E_1 + \varepsilon)}}.$$

(3)

При подстановке числовых значений получим $n=2$.

В состоянии $n=2$ электрон может находиться :

либо в s -состоянии с $l=0$; $L = \hbar \cdot \sqrt{l(l+1)} = 0$, $L_z = \hbar m_l = 0$,

либо в p -состоянии с $l=1$; $L = \hbar \cdot \sqrt{2}$, $L_z = \hbar m_l = -\hbar, 0, \hbar$.

Соответствующие магнитные моменты и их проекции на ось z :

s -состояние $l=0$, $\mu_L = \mu_B \cdot \sqrt{l(l+1)} = 0$, $\mu_{Lz} = -\mu_B \cdot m_l = 0$

p -состояние $l=1$, $\mu_L = \mu_B \cdot \sqrt{2}$, $\mu_{Lz} = -\mu_B \cdot m_l = -\mu_B, 0, \mu_B$.

Величина спинового магнитного момента для любого орбитального состояния $\mu_s = 2\mu_B \cdot \sqrt{s(s+1)} = \mu_B \sqrt{3}$ и его проекция на ось z : $\mu_s = -2m_s \cdot \mu_B = \pm \mu_B$,

для $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Ответ: s -состояние $l=0$, $\mu_L = 0$, $\mu_{Lz} = 0$

p -состояние $l=1$, $\mu_L = \mu_B \cdot \sqrt{2}$, $\mu_{Lz} = \mp \mu_B, 0$.

Задачи для самостоятельного решения.

3.1 Волновая функция основного состояния для электрона в атоме водорода имеет вид

$\psi_{100} = C e^{-\frac{r}{a}}$. Исходя из условия нормировки, найти постоянную C . Затем с помощью уравнения Шредингера получить выражение для энергии основного состояния E_1 и боровского радиуса a .

3.2 Электрон в атоме водорода находится в состоянии, описываемом волновой

функцией $\psi_{200} = A \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\alpha r}$, где a – боровский радиус, A , α – постоянные.

Найти : а) с помощью уравнения Шредингера постоянную α и энергию E_2 электрона в этом состоянии, б) нормировочный коэффициент A .

3.3 Атом водорода находится в основном состоянии. Вычислить отношение вероятностей w_1/w_2 нахождения электрона в сферических слоях толщиной $\Delta r = 0,01a$ и радиусами $r_1=0,5a$ и $r_2=1,5a$, где a – радиус Бора.

3.4 Электрон в атоме водорода в основном состоянии $1s$. Найти: а) наиболее вероятное расстояние от ядра r_m , вероятности нахождения в областях $r < r_m$; $r > r_m$ и сравнить их, б) среднее расстояние от ядра $\langle r \rangle$, средний квадрат расстояния $\langle r^2 \rangle$, среднеквадратичное отклонение $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle$, в) средние значения кинетической и потенциальной энергий, а также среднее значение полной энергии. Ответы выразить в эВ.

3.5 То же, что и в предыдущей задаче, но электрон находится в возбужденном состоянии $2s$.

3.6 Найти средний электростатический потенциал, создаваемый $1s$ -электроном на ядре атома водорода.

3.7 Вычислить момент количества движения L и его возможные проекции на ось z для электрона, находящегося в атоме: а) в s – состоянии, б) в p – состоянии, в) в d – состоянии.

- 3.8 Вычислить полную энергию E , орбитальный момент количества движения L , орбитальный μ_L и спиновый μ_S магнитные моменты электрона, находящегося в $2p$ -состоянии в атоме водорода.
- 3.9 Электрон, поглотив квант света, перешел в возбужденное состояние с энергией $E = 0,85$ эВ. Определить возможные значения орбитального момента количества движения L , орбитального μ_L и спинового μ_S магнитных моментов, а также их проекции на направление внешнего магнитного поля в возбужденном состоянии.
- 3.10 Электрон, поглотив квант света с энергией $\varepsilon = 12,09$ эВ, перешел в возбужденное состояние. Определить возможные значения L , μ_L и μ_S , а также их проекции на направление внешнего магнитного поля в этом состоянии.
- 3.11 Какое максимальное число s -, p -и d - электронов может находиться в K -, L -, M -электронных оболочках атома.
- 3.12 Используя принцип Паули, указать какое максимальное число электронов в атоме может иметь одинаковыми следующие квантовые числа: а) n, l, m_l, m_s ; б) n, l, m_l ; в) n, l ; г) n .
- 3.13 Заполненная электронная оболочка соответствует M -оболочке. Указать число N электронов в этом слое, которые имеют следующие квантовые числа: 1) $m_s = 1/2$, 2) $m_l = -2$, 3) $m_s = -1/2$ и $m_l = 0$, 4) $m_s = 1/2$ и $l = 2$.
- 3.14 Указать атомы, у которых в основном состоянии заполнены: а) K - и L -оболочки, а также $3s$ -орбиталь и наполовину $3p$ -орбиталь, б) K -, L -, M -оболочки, а также $4s$ -, $4p$ -, $4d$ -орбитали.
- 3.15 Написать формулы электронного строения атомов: а) бора, б) углерода, в) натрия, г) хлора, д) кремния.

2.1 Функции распределения для невырожденного и вырожденного коллективов частиц

Связь между состоянием всего тела и состоянием частиц его составляющих дается *полной статистической функцией распределения* $N(E)$. Величина $N(E) \cdot dE$ определяет число частиц с энергиями от E до $E+dE$ в системе с хим. потенциалом μ и температурой T .

Для нахождения $N(E)$ необходимо знать: $g(E)$ – *плотность состояний частиц* и $f(E)$ – *функцию распределения*, характеризующую вероятность заполнения состояния с энергией E , т.е.

$$N(E) \cdot dE = g(E) \cdot f(E) \cdot dE. \quad (2.1)$$

Для свободных электронов с квадратичным законом дисперсии $E = p^2 / 2m$, спином $s = 1/2$ и объемом системы V

$$g(E) = 4\pi V \cdot (2m)^{3/2} \cdot (E)^{1/2} / h^3. \quad (2.2)$$

Число электронов в интервале энергий от E_1 до E_2

$$N(E_1, E_2) = \int_{E_1}^{E_2} N(E) \cdot dE. \quad (2.3)$$

Среднее статистическое любой физической величины $A(E)$ в случае квазинепрерывного энергетического спектра:

$$\langle A \rangle = \int_0^{\infty} A(E) \cdot N(E) \cdot dE / \int_0^{\infty} N(E) \cdot dE. \quad (2.4)$$

Функции распределения $f(E)$.

1) **Статистика Максвелла-Больцмана.** Невырожденный электронный газ описывается статистикой Максвелла-Больцмана (рис. 4, 5):

$$f_{M-B}(E) = \exp[(\mu - E)/kT], \quad \mu < 0, \quad f_{M-B} \ll 1, \quad (2.5)$$

$$N(E) = 4\pi V h^{-3} (2m)^{3/2} (E)^{1/2} \exp[(\mu - E)/kT]. \quad (2.6)$$

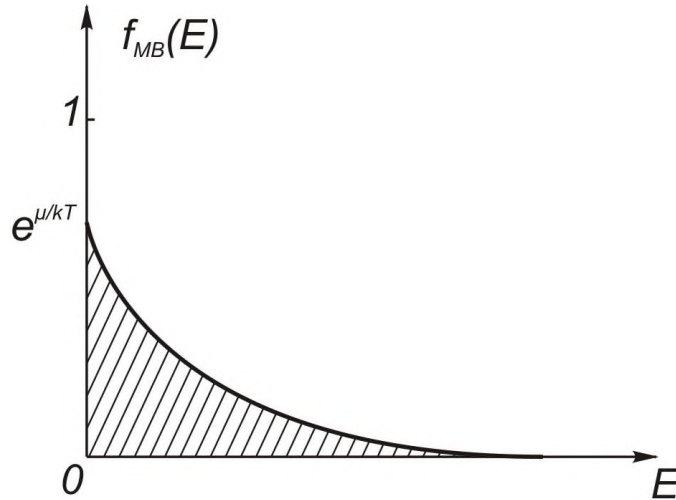


Рис. 4. Функция распределения Максвелла-Больцмана

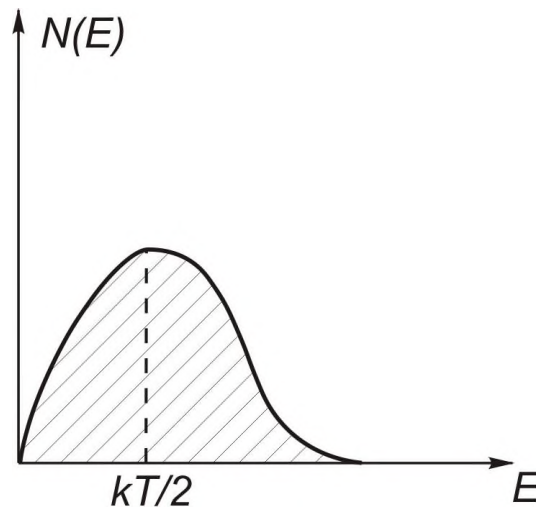


Рис. 5. Полная статистическая функция для невырожденного газа

2) **Статистикой Ферми-Дирака.** Вырожденный электронный газ описывается статистикой Ферми-Дирака

$$f_{F-D}(E) = 1 / \left[\exp\{(E - \mu) / kT\} + 1 \right], \quad (2.7)$$

при $E = \mu$, $f_{F-D}(E) = 1/2$ при любой температуре. Химический потенциал μ по определению – уровень с половинным заполнением.

Функции распределения $f(E)$ и $N(E)$ при $T = 0$ К (рис. 6, 7) имеют вид

$$f(E) = \begin{cases} 1, & E < \mu_0 \\ 0, & E > \mu_0 \end{cases}; \quad N(E) = \begin{cases} 4\pi V (2m)^{3/2} (E)^{1/2} / h^3, & E < \mu_0 \\ 0, & E > \mu_0 \end{cases}. \quad (2.8)$$

Последний заполненный при абсолютном нуле уровень энергии называется уровнем Ферми E_F .

Для квазинепрерывного энергетического спектра (электронный газ в металле) значения хим.потенциала при $T = 0$ и энергии Ферми совпадают

$$\mu_0 = E_F = h^2 (3n/8\pi)^{2/3} / 2m, \quad (2.9)$$

где $n = N/V$ – плотность электронов.

Физический смысл энергии Ферми: максимальная кинетическая энергия электронов при абсолютном нуле температуры.

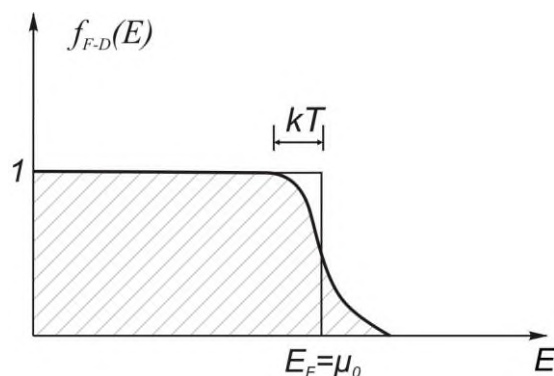


Рис.6. Функция распределения Ферми-Дирака

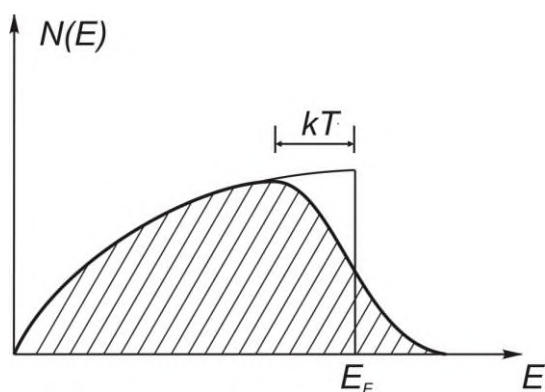


Рис. 7. Полная функция распределения для вырожденного газа электронов

С ростом температуры T ($T > 0$) ступеньки в функциях распределения $f(E)$ и $N(E)$ размываются в слое $\sim kT$ у E_F (см. рис. 6, 7). Часть электронов из этого слоя, приобретая тепловую энергию kT , занимает более высокие свободные уровни. С увеличением T хим.потенциал уменьшается и при $T = T_0 \cong T_F$ обращается в нуль. При температурах $T > T_0$ происходит снятие вырождения и электронный газ в металле можно описывать статистикой Максвелла – Больцмана, так как $\exp[(E - \mu)/kT] \gg 1$.

3) **Статистика Бозе – Эйнштейна.** Функция распределения газа бозонов – статистика Бозе – Эйнштейна

$$f_{B-E}(E) = 1 / [\exp\{(E - \mu)/kT\} - 1]. \quad (2.10)$$

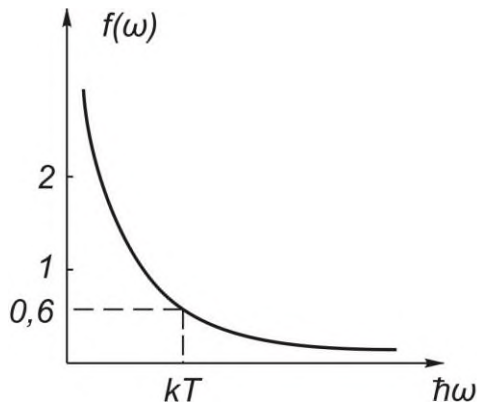


Рис. 8. Функция распределения

В равновесии между телом и его излучением число фотонов определяется только энергией излучения и температурой тела. Фотонный газ – система с переменным числом частиц, поэтому хим.потенциал фотонов равен нулю. Фотоны – частицы, движущиеся со скоростью света $c = 3 \cdot 10^8$ м/с, масса покоя фотонов равна нулю. Их энергия связывает между собой частоту света и импульс фотона (корпускулярно-волновой дуализм)

$$E = \hbar\omega = cp. \quad (2.11)$$

Число квантовых осцилляторов в интервале частот света ω , $\omega + d\omega$

$$g(\omega) d\omega = \omega^2 d\omega / \pi^2 c^3, \quad (2.12)$$

где $g(\omega)$ – плотность состояний (число квантовых осцилляторов в единичном интервале частот около ω , на единицу объема тела).

Функция распределения фотонов:

$$f(\omega) = 1 / [\exp(\hbar\omega/kT) - 1], \quad (2.13)$$

определяет среднее число фотонов с частотой ω при температуре T , (рис. 8)

Средняя энергия квантового осциллятора:

$$\langle E_\omega \rangle = \hbar\omega / [\exp(\hbar\omega/kT) - 1] + \hbar\omega / 2 = \langle E_\omega^T \rangle + \hbar\omega / 2, \quad (2.14)$$

где $\hbar\omega / 2$ – энергия нулевых колебаний.

Средняя плотность энергии теплового излучения U_ω^T определяется формулой Планка (рис. 9):

$$U_\omega^T = \langle E_\omega^T \rangle g(\omega) = \hbar\omega^3 / \pi^2 c^3 [\exp(\hbar\omega/kT) - 1]. \quad (2.15)$$

При высоких температурах хим.потенциал μ отрицателен (т.к. $f_{B-E} \gg 0$). С понижением температуры μ растет и при $T = T_0$ обращается в нуль. Здесь T_0 – температура вырождения. Ниже T_0 реализуется явление бозе – эйнштейновской конденсации, когда все бозоны скапливаются в состоянии с минимальной энергией $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

При $T > T_0$, $\exp[(E - \mu)/kT] \gg 1$ бозоны, как и фермионы, подчиняются классическому распределению Максвелла – Больцмана. В качестве примера газа бозонов рассмотрим газ фотонов.

Фотонный газ

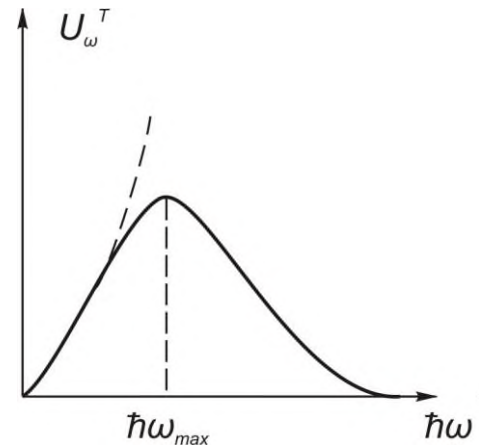


Рис. 9. Средняя плотность энергии теплового излучения

При $\hbar\omega \ll kT$, закон Релея-Джинса.

$$U_{\omega}^T = \omega^2 kT / \pi^2 c^3, \quad (2.16)$$

При $\hbar\omega \gg kT$, формула Вина.

$$U_{\omega}^T = (\hbar\omega^3 / \pi^2 c^3) \exp(-\hbar\omega / kT), \quad (2.17)$$

Закон смещения Вина (с нагреванием тел максимальные частоты в спектре их излучения растут пропорционально T)

$$\hbar\omega_{\max} = 2,82kT. \quad (2.18)$$

Полная энергия теплового излучения:

$$\begin{aligned} U_T &= \int_0^{\infty} U_{\omega}^T d\omega = (\hbar / \pi^2 c^3) \int_0^{\infty} \omega^3 d\omega / [\exp(\hbar\omega / kT) - 1] = \\ &= (kT)^4 / \pi^2 c^3 \hbar^3 \int_0^{\infty} x^3 dx / [\exp(x) - 1] = \pi^2 (kT)^4 / 15 c^3 \hbar^3. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Энергетическая светимость тела – полная мощность теплового излучения с единицы площади поверхности – закон Стефана-Больцмана:

$$M_e = cU_T / 4 = \pi^2 (kT)^4 / 60 \hbar^3 c^2 = \sigma T^4. \quad (2.20)$$

Примеры решения задач

Задача 1. Металл находится при абсолютном нуле температуры. Определить во сколько раз число электронов с кинетической энергией от $E_F/2$ до E_F больше числа электронов с энергией от 0 до $E_F/2$.

Решение

Число электронов, которые лежат в интервале от E_1 до E_2 , определяется выражением:

$$N = \int_{E_1}^{E_2} N(E) dE, \quad (1)$$

$$\text{при } T = 0\text{К } N(E) = \begin{cases} 4\pi V (2m)^{3/2} (E)^{1/2} dE / \hbar^3, & \text{при } E < E_F, \\ 0, & \text{при } E > E_F \end{cases}, \quad (2)$$

тогда отношение числа электронов N_1 с энергиями от $E_F/2$ до E_F к числу электронов N_2 с энергиями от 0 до $E_F/2$ есть:

$$N_1 / N_2 = \int_{E_F/2}^{E_F} E^{1/2} dE / \int_0^{E_F/2} E^{1/2} dE = \left\{ E_F^{3/2} - (E_F/2)^{3/2} \right\} / (E_F/2)^{3/2} = 2^{3/2} - 1 = 1,828.$$

Ответ: $N_1 / N_2 = 1,828$.

Задача 2. Определить температуру металла, при которой вероятность обнаружить электрон в состоянии с энергией на 0,05 эВ выше E_F равна 0,02.

Решение

Вероятность обнаружить электрон в состоянии с энергией E при температуре T определяется функцией распределения Ферми-Дирака

$$f(E, T) = 1 / \left\{ \exp\left[(E - E_F) / kT \right] + 1 \right\}, \quad (kT \ll E_F \text{ и } \mu \cong E_F).$$

По условию задачи $E - E_F = 0,05 \text{ эВ} = 0,08 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ и $f(E, T) = 0,02$. Отсюда

$$\begin{aligned}\exp\left[\frac{E - E_F}{kT}\right] + 1 &= 1/f, \\ \exp\left[\frac{E - E_F}{kT}\right] &= (1/f) - 1 = 49, \\ \frac{E - E_F}{kT} &= \ln(f^{-1} - 1),\end{aligned}$$

$$T = (E - E_F) / k \ln(f^{-1} - 1) = 0,08 \cdot 10^{-19} / 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot \ln 49 \approx 150 \text{ К.}$$

Ответ: $T \approx 150 \text{ К.}$

Задача 3. С помощью формулы Планка найти среднее значение частоты ω и наиболее вероятную частоту в спектре теплового излучения при температуре T .

Решение

Распределение частот в спектре теплового излучения дается формулой Планка

$$U_{\omega}^T = \hbar \omega^3 / \pi^2 c^3 \left[\exp(\hbar \omega / kT) - 1 \right].$$

Тогда средняя частота теплового излучения определяется выражением

$$\langle \omega \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \omega u_{\omega}^T d\omega}{\int_0^{\infty} u_{\omega}^T d\omega} = \frac{\int_0^{\infty} \frac{\omega^4 d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}}{\int_0^{\infty} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}} = \left| \frac{\hbar \omega}{kT} = x \right| = \frac{kT}{\hbar} \frac{\int_0^{\infty} \frac{x^4 dx}{e^x - 1}}{\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}} = 3,83 \frac{kT}{\hbar}.$$

Наиболее вероятная частота в спектре теплового излучения при данной температуре находится из условия максимума распределения Планка: $\frac{\partial u_{\omega}^T}{\partial \omega} = 0$.

$$\frac{\partial u_{\omega}^T}{\partial \omega} = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \left(3\omega^2 - \frac{\hbar \omega^3}{kT} \frac{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}}}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \right) = 0$$

Пусть $\frac{\hbar \omega}{kT} = x$, тогда получим $3 - \frac{x e^x}{e^x - 1} = 0$,

$3(e^x - 1) = x e^x$, $x = 0$ - тривиальное решение, соответствующее минимуму.

$(3 - x)e^x = 3 \Rightarrow x < 3$, т.к. e^x меняется быстрее.

Пусть $x = 2$, тогда $e^2 > 3$, то есть, x заключен между 2 и 3.

В качестве нулевого приближения возьмем $x = 3$ в экспоненте, тогда получим

$$(3 - x) = 3e^{-3} \Rightarrow x = 3(1 - e^{-3}) \Rightarrow x = 2,82.$$

Таким образом, наиболее вероятная частота в спектре теплового излучения

$$\omega_{н.в} = 2,82 \frac{kT}{\hbar}.$$

$$\text{Ответ: } \omega_{н.в} = 2,82 \frac{kT}{\hbar}, \quad \langle \omega \rangle = 3,83 \frac{kT}{\hbar}.$$

Задачи для самостоятельного решения

4.1 Определить концентрацию свободных электронов в металле. Энергию Ферми принять равной 1 эВ.

4.2 Найти разницу энергий (в единицах kT) между электроном, находящимся на уровне Ферми

- и электронами, находящимися на уровнях, вероятности заполнения которых равны, соответственно 0,2 и 0,8.
- 4.3 Определить температуру, при которой в твердом проводнике вероятность нахождения электрона с энергией на $0,1 \text{ эВ}$ E_F равна 0,05.
 - 4.4 Половина всех электронов в металле при $T=0 \text{ К}$ обладает кинетическими энергиями большими, чем некоторая энергия E . Вычислить величину этой энергии в долях энергии Ферми E_F .
 - 4.5 Найти температуру вырождения электронного газа в металле, если концентрация свободных электронов равна $n = 10^{28} \text{ м}^{-3}$.
 - 4.6 Найти долю свободных электронов в металле при температуре $T=0 \text{ К}$, кинетическая энергия которых больше половины максимальных.
 - 4.7 Найти интервал между соседними уровнями энергии электронов в металле вблизи уровня Ферми, если объем металла $V = 1 \text{ см}^3$, а концентрация электронов $n = 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Ответ выразить в электронвольтах.
 - 4.8 Зная распределение электронов в металле по энергиям $N(E)dE$, вывести распределение электронов по скоростям $N(v)dv$. Найти частный случай распределения при $T=0 \text{ К}$ и вычислить средние значения скорости $\langle v \rangle$ и квадрата скорости $\langle v^2 \rangle$. Ответы выразить через фермиевскую скорость v_F .
 - 4.9 Пользуясь результатом предыдущей задачи, определить во сколько раз число электронов со скоростями большими $v_F/2$ превышает число электронов со скоростями меньшими $v_F/2$ при $T=0 \text{ К}$.
 - 4.10 Вычислить среднюю энергию электронов в металле при температуре $T=0 \text{ К}$. Ответ выразить через энергию Ферми.
 - 4.11 Найти суммарную кинетическую энергию электронов в 1 см^3 меди, если концентрация $n = 8 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$.
 - 4.12 Преобразовать формулу Планка для распределения по частотам u_ω^T к виду, соответствующему распределению по длинам волн u_λ^T и найти наиболее вероятную длину волны λ_m в спектре излучения.
 - 4.13 Найти наиболее вероятную длину волны λ_m в спектре теплового излучения с энергетической светимостью $M = 5,7 \text{ Вт/см}^2$.
 - 4.14 Солнечный спектр близок к спектру абсолютно черного тела с наиболее вероятной длиной волны $\lambda_m = 0,48 \text{ мкм}$. Найти мощность теплового излучения Солнца и его температуру.
 - 4.15 Определить с помощью формулы Планка числовое значение постоянной Стефана – Больцмана.
 - 4.16 Определить с помощью формулы Планка найти температуру теплового излучения, средняя длина волны которого $\langle \lambda \rangle = 2,67 \text{ мкм}$.
 - 4.17 Воспользовавшись формулой Вина для теплового излучения, найти : а) наиболее вероятную частоту ω_m и длину волны λ_m , б) среднюю частоту $\langle \omega \rangle$ и длину волны $\langle \lambda \rangle$.
 - 4.18 Во сколько раз надо увеличить термодинамическую температуру черного тела, чтобы его энергетическая светимость M_e возросла в два раза.
 - 4.19 Определить с помощью формулы Планка во сколько раз возрастет спектральная плотность излучения с длиной волны $\lambda = 0,6 \text{ мкм}$ при увеличении температуры от $T_1 = 2000 \text{ К}$ до $T_2 = 2300 \text{ К}$.
 - 4.20 С помощью формулы Планка найти полное число фотонов в 1 см^3 черного тела при $T = 300 \text{ К}$.

3.1 Элементы кристаллофизики

Кристаллическая решетка есть пространственная сетка, в узлах которой расположены атомы, молекулы или ионы, образующие кристалл.

Параллелепипед, построенный на трех наименьших некопланарных векторах $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, таких, что при трансляции на один из них, кристалл совмещается сам с собой, называется элементарной ячейкой. Эти некопланарные векторы $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ называются *базисными*.

Объем элементарной ячейки:

$$V_0 = \vec{a}_1 [\vec{a}_2 \times \vec{a}_3]. \quad (3.1)$$

Существует целая наука о симметрии кристаллов - кристаллография. Форма элементарной ячейки определяет сингонию кристаллов. Всего существует 7 различных сингоний. Подробнее остановимся на кубической сингонии, где все ребра равны между собой и углы элементарной ячейки прямые, то есть:

$$a_1 = a_2 = a_3 = a \text{ и } \alpha = \beta = \gamma = 90.$$

В кристаллах кубической сингонии возможны четыре случая:

а) *Простая кубическая решетка (P)*. (Рис.10а).

Число атомов в ячейке $n = \frac{1}{8} \cdot 8 = 1.$

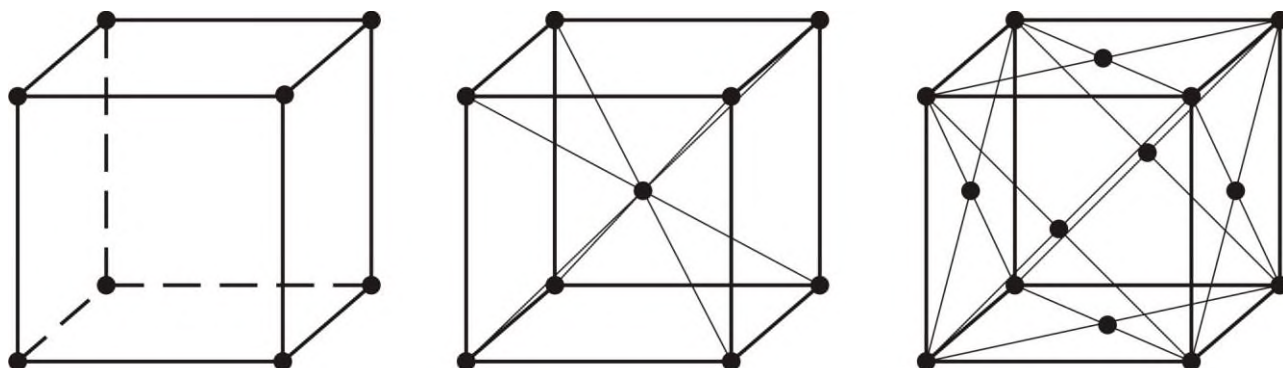
Число ближайших соседей $k = 6.$

Постоянная решетки $d = a.$

Объем элементарной ячейки: $V_0 = a^3$

б) *Объемно-центрированная кубическая решетка (J)*. (Рис.10б).

$$n = 2, k = 8, d = \frac{a\sqrt{3}}{2}.$$



а)

б)

в)

Рис. 10. Типы кубических решеток: а) простая; б) объемно-центрированная; в) гранецентрированная

в) *Гранецентрированная кубическая решетка (F)*. (Рис 10в).

$$n = 4, k = 12, d = \frac{a}{\sqrt{2}}.$$

Молярный объем кристалла определяется выражением

$$V_\mu = \frac{M}{\rho}, \quad (3.2)$$

где M – молярная масса, ρ – плотность кристалла, $M = \sum_{i=1}^n n_i A_i \cdot 10^{-3}$ кг/моль, где A_i – относительная атомная масса, n_i – число атомов i – элемента в химической формуле вещества.

Число элементарных ячеек в моле может быть определено как отношение молярного объема V_μ к объему одной молекулы V_0

$$Z_m = \frac{V_\mu}{V_0} = \frac{M}{\rho \cdot V_0}. \quad (3.3)$$

С другой стороны $Z_m = \frac{k N_A}{n}$, где N_A – число атомов в моле, n – число атомов в ячейке, k – число одинаковых атомов в химической формуле соединения, $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$ 1/моль – число Авогадро.

Данные выражения позволяют связать между собой ρ, V_0 и n :

$$\frac{M}{\rho \cdot V_0} = \frac{k N_A}{n} \Rightarrow V_0 = \frac{M n}{k N_A \rho}. \quad (3.4)$$

Для кубической решетки $V_0 = a^3$, следовательно, период решетки a и плотность кристалла могут быть определены выражениями:

$$a = \sqrt[3]{\frac{n M}{k N_A \rho}} \text{ и } \rho = \frac{n M}{k N_A \cdot a^3}. \quad (3.5)$$

Индексы Миллера.

Положение любого узла решетки определяется заданием трех координат (x, y, z) . Эти координаты можно выразить так:

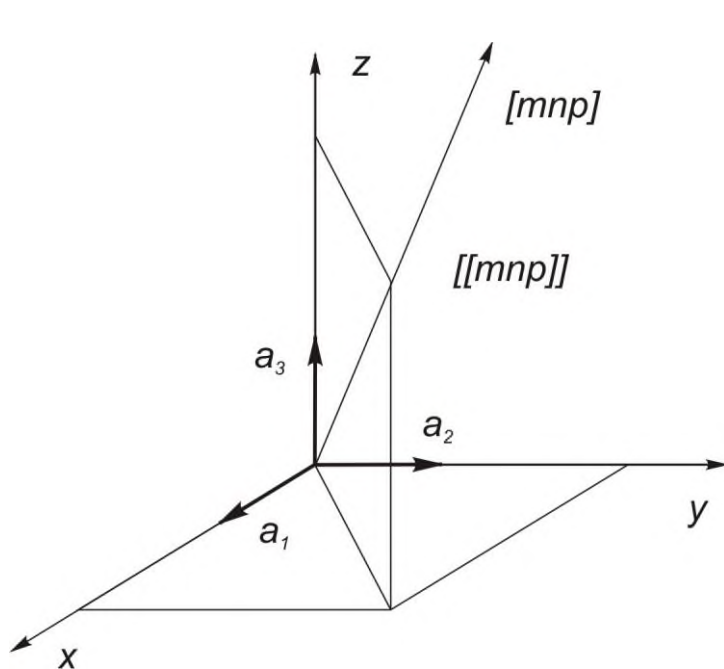


Рис. 11. Определение индексов Миллера

$$\begin{aligned} \overline{OX} \Pi \vec{a}_1 & \quad x = m a_1 \\ \overline{OY} \Pi \vec{a}_2 & \quad y = n a_2 \\ \overline{OZ} \Pi \vec{a}_3 & \quad z = p a_3 \end{aligned}$$

где $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ – параметры решетки, m, n, p – целые числа. Если за единицы измерения длин принять параметры решетки, то координаты узла будут просто числа m, n, p ; т.е. $[[m \ n \ p]]$ – индексы Миллера узлов (рис. 11).

Для описания направления в кристалле, выбирается прямая, проходящая через начало координат, и направление ее однозначно определяется индексами первого узла, через который она проходит. Поэтому индексы узла одновременно являются и индексами

направления, которые записываются в одинарных квадратных скобках: $[m \ n \ p]$ – *индексы Миллера направления*.

Чтобы провести кристаллографическую плоскость, надо знать 3 точки. Можно воспользоваться значениями m, n, p , но если плоскость параллельна какой-либо из осей, то одно из значений обращается в бесконечность. Поэтому используют обратные величины и приводят их к общему знаменателю.

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = \frac{h:k:l}{D}$$

Знаменатель отбрасывают и получают *индексы Миллера* $(h \ k \ l)$ для *плоскости*.

Период идентичности – это расстояние между соседними одинаковыми атомами вдоль определенного направления в решетке.

$$l = a\sqrt{m^2 + n^2 + p^2}. \quad (3.6)$$

Межплоскостное расстояние для простой кубической решетки:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (3.7)$$

Примеры решения задач.

Задача 1. Найти плотности ионных кристаллов $NaCl$ и $CsCl$ если они кристаллизуются, соответственно в ГЦК решетку с постоянной решетки $a=5,63 \text{ \AA}$ и ОЦК с $a=4,11 \text{ \AA}$.

Решение

Плотность кристалла определяется формулой $\rho = \frac{nM}{\kappa N_A a^3}$, где M - молярная масса

вещества, n - число атомов в ячейке, $(\kappa N_A - \text{число атомов в моле, } a - \text{постоянная решетки})$. Определим молярную массу для $NaCl$:

$$M_{NaCl} = (A_{Na} + A_{Cl})10^{-3} = (23 + 35,5) 10^{-3} = 58,5 10^{-3} \text{ (кг/моль)}.$$

Так как $NaCl$ кристаллизуется в ГЦК решетку, то число атомов в ячейке равно: $n = 4$. Определим плотность $NaCl$:

$$\rho_{NaCl} = \frac{58,5 \cdot 10^{-3} \cdot 4}{6,02 \cdot 10^{23} \cdot (5,63 \cdot 10^{-10})^3} \approx 2,2 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3.$$

Проведя аналогичные действия, найдем плотность $CsCl$.

$$M = (A_{Cs} + A_{Cl}) \cdot 10^{-3} = (133 + 35,5) \cdot 10^{-3} = 168,5 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}.$$

Для ОЦК $n=2$, тогда плотность $CsCl$ равна:

$$\rho_{CsCl} = \frac{168,5 \cdot 10^{-3} \cdot 2}{6,02 \cdot 10^{23} \cdot (4,11 \cdot 10^{-10})^3} = 0,41 \cdot 10^4 = 4,1 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.$$

Ответ: $\rho_{CsCl} = 4,1 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$.

Задача 2. Система плоскостей в примитивной кубической решетке задана индексами Миллера (221) . Найти наименьшие отрезки, отсекаемые плоскостью на осях координат, и изобразить эту плоскость графически.

Решение

Индексы Миллера плоскости обозначаются (hkl) . В нашем случае $(hkl)=(221)$. Чтобы определить отрезки, отсекаемые плоскостью на осях координат, необходимо записать обратные величины и привести к общему знаменателю $\frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l} = \frac{m:n:p}{D}$. Целые числа

m, n, p - определяют количество единичных отрезков вдоль соответствующих осей.

$$\frac{1}{2} : \frac{1}{2} : \frac{1}{1} = \frac{1:1:2}{2}, m=1, n=1, p=2.$$

Задачи для самостоятельного решения

- 5.1 Определить число элементарных ячеек кристалла объемом $V = 1 \text{ м}^3$: 1) хлористого цезия (решетка объемно – центрированная кубической сингонии); 2) меди (решетка гранецентрированная кубической сингонии).
- 5.2 Найти плотность ρ кристалла неона при 20 К, если известно, что решетка гранецентрированная кубической сингонии. Постоянная решетки a при той же температуре равна 0,452 нм.
- 5.3 Найти плотность ρ кристалла стронция, если известно, что решетка гранецентрированная кубической сингонии, а расстояние d между ближайшими соседними атомами равно 0,43 нм.
- 5.4 Определить относительную атомную массу кристалла, если известно, что расстояние d между ближайшими соседними атомами равно 0,304 нм. Решетка объемно – центрированная кубической сингонии. Плотность кристалла ρ равна 534 кг/м³.
- 5.5 Найти постоянную a решетки и расстояние d между ближайшими соседними атомами кристалла: 1) алюминия (решетка гранецентрированная кубической сингонии); 2) вольфрама (решетка объемно – центрированная кубической сингонии).
- 5.6 Вычислить период l идентичности вдоль прямой $[111]$ в решетке кристалла NaCl , если плотность ρ кристалла равна $2,17 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.
- 5.7 Плоскость проходит через узлы кубической решетки. Написать индексы Миллера для этой плоскости.
- 5.8 Система плоскостей в примитивной кубической решетке задана индексами Миллера (221) . Найти наименьшие отрезки, отсекаемые плоскостью на осях координат, и изобразить эту плоскость графически.
- 5.9 Написать индексы Миллера для плоскостей, содержащих узлы с кристаллографическими индексами, в двух случаях: 1) $[123]$, 2) $[01\bar{1}]$. Найти отрезки, отсекаемые этими плоскостями на осях координат.
- 5.10 Система плоскостей примитивной кубической решетки задана индексами (111) . Определить расстояние d между соседними плоскостями, если параметр a решетки равен 0,3 нм
- 5.11 Определить параметр a примитивной кубической решетки, если межплоскостное расстояние d для системы плоскостей, заданных индексами Миллера (212) при рентгеноструктурном измерении, оказалось равным 0,12 нм.

3.2 Тепловые свойства твердых тел

Коллективное колебание всех атомов решетки с одной и той же частотой ω , называется нормальным колебанием кристалла, а ω - частотой нормального колебания. Соотношение, связывающее частоту нормальных колебаний ω с волновым числом q , называется дисперсным соотношением.

Линейная одноатомная цепочка. В качестве примера на рис 12(а) показана одномерная модель твердого тела – линейная цепочка из N - атомов, расстояние между которыми a , причем они способны колебаться в одном направлении перпендикулярно оси цепочки. Дисперсионное соотношение имеет вид:

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|, \quad (3.8)$$

где $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ - волновой вектор, совпадающий по направлению с направлением распространения колебаний, λ - длина волны, β - коэффициент жесткости связи, действующей между частицами тела, m - масса атома.

В пределе длинных волн $q = \frac{2\pi}{\lambda}$, тогда $\omega(q) \approx v_s |q|$, где $v_s = a\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ - скорость звука. Присутствуют только акустические нормальные колебания, оптические отсутствуют (рис. 12).

Границы зоны Бриллюэна $|q| = \frac{\pi}{a}$ соответствуют стоячие волны, которые энергии не переносят и групповая скорость (1.16) обращается в ноль: $v_g = 0$.

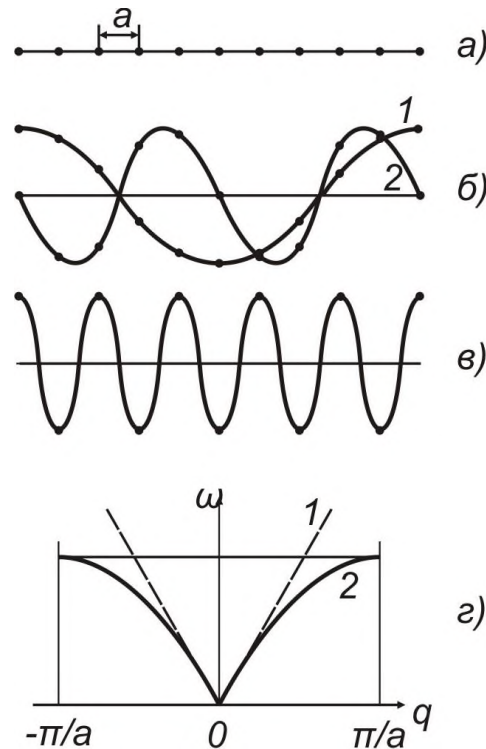


Рис. 12. Нормальные колебания линейной цепочки, состоящей из одинаковых атомов: а) линейная цепочка; б) нормальные колебания цепочки; в) нормальное колебание цепочки, отвечающее самой короткой волне (наибольшей частоте); г) дисперсионная кривая, выражающая зависимость частоты нормальных колебаний от волнового вектора

Линейная двухатомная цепочка. Рассмотрим теперь цепочку, состоящую из атомов 2-х типов, правильно чередующихся друг с другом (рис. 13 а). Обозначим массу более тяжелых атомов через M , более легких – через m .

Дисперсионное соотношение имеет вид:

$$\omega_{\pm}^2(q) = \frac{\beta(m+M)}{mM} \left[1 \pm \left(1 - \frac{4mM}{(m+M)^2} \sin^2 qa \right)^{1/2} \right] \quad (3.9)$$

На рис. 13 показаны дисперсионные кривые для нормальных акустических и оптических колебаний цепочки. В то время как для акустических колебаний частота ω_- растет с увеличением q и достигает максимального значения при $q_{max} = \pi/a$, для оптических колебаний ω_{max} имеет место при $q = 0$; с ростом q частота этих колебаний ω уменьшается и становится минимальной при $q_{max} = \pi/a$.

$$\omega_{ак} \approx qv_s; \quad \omega_{опт} \approx 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} = \frac{v_s}{a}. \quad (3.10)$$

Полное число нормальных колебаний в конечной цепочке $L = 2Na$ равно числу степеней свободы $2N$.

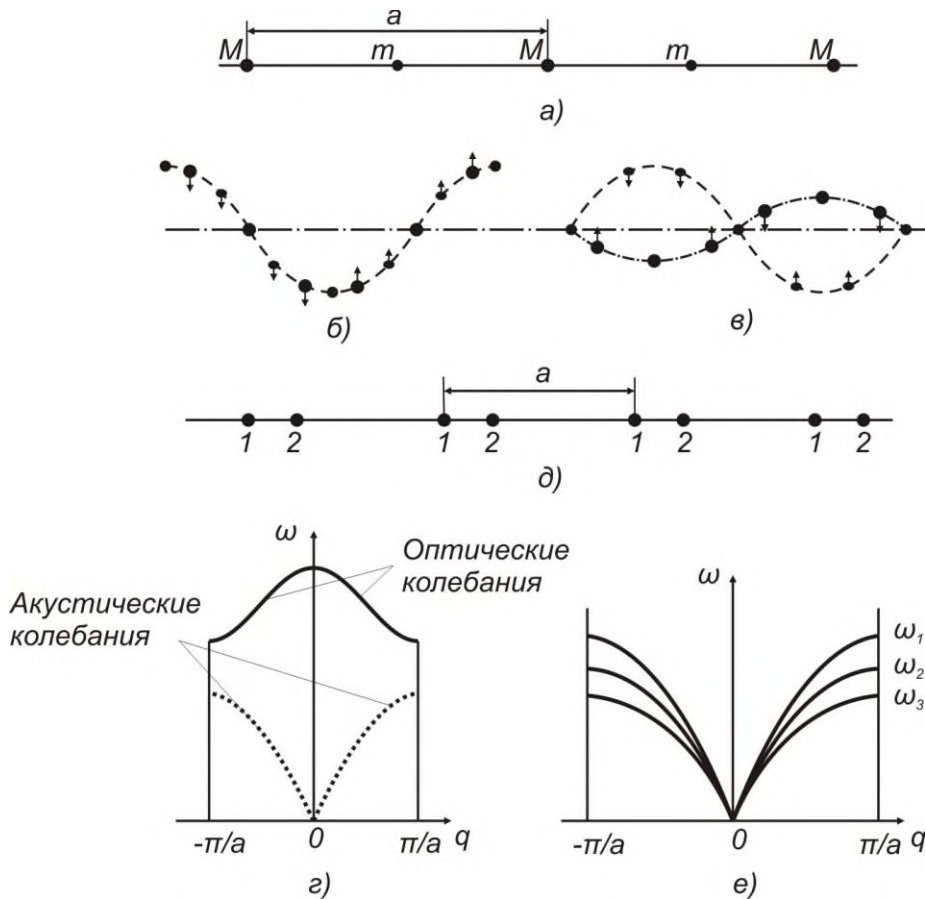


Рис. 13. Нормальные колебания цепочки, состоящей из атомов двух сортов: а) расположение атомов в цепочке; б) акустические нормальные колебания; в) оптические нормальные колебания; г) дисперсионные кривые для акустических и оптических нормальных колебаний; д) линейная решетка с базисом, в котором возникают оптические колебания; е) акустические ветви нормальных колебаний трехмерной решетки

Колебания трехмерной решетки. В трехмерном кристалле, состоящем из N элементарных ячеек по S атомов в каждой, возникают 3 акустические ветви колебаний, для которых все атомы одной ячейки колеблются вместе как одно целое и $3(S-1)$ оптические ветви. Общее число нормальных колебаний $3NS$, где N – полное число

атомов. Дисперсионные кривые для нормальных акустических и оптических колебаний представлены на рис. 13 (г,е).

Квантование решеточных колебаний. Фононы. Рассмотрим кубический кристалл, состоящий из N ячеек по одному атому в ячейке. Оптических ветвей не будет. Каждому из $3N$ нормальных колебаний $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{3N}$ поставим в соответствие $3N$ квантовых осцилляторов с собственными частотами $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{3N}$. Появление одной или нескольких тепловых волн с частотами ω_q , будем описывать на языке перехода этих осцилляторов в соответствующее возбужденное состояние с энергией $E = \hbar\omega(n+1/2)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$, то есть как рождение соответствующего числа фононов – квантов решеточных колебаний.

Полная тепловая энергия кристалла определяется выражением:

$$E_n = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \hbar\omega N(\omega) d\omega, \quad (3.11)$$

где $N(\omega)d\omega = f(\omega)g(\omega)d\omega$ - число фононов в интервале частот $(\omega; \omega+d\omega)$, $g(\omega)d\omega$ - число квантовых осцилляторов в интервале частот $(\omega; \omega+d\omega)$.

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \left[\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right] \omega^2 d\omega, \quad (3.12)$$

где V – объем кристалла, v_l скорость продольных колебаний, v_t – скорость поперечных колебаний. Для линейного закона дисперсии $\omega_{l,t} = v_{l,t}|q|$.

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (3.13)$$

Выражение (6.7) определяет вероятность рождения фононов с энергией $\hbar\omega$ при температуре T .

Теплоемкость кристаллической решетки

Классическая теория. При любой температуре T возбуждаются все $3N$ нормальных колебаний решетки, и на каждое из них приходится энергия kT . Полная энергия тепловых колебаний:

$$E = 3NkT, \quad (3.14)$$

где $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

Теплоемкость кристалла определяет его способность нагреваться, т.е. отбирать тепло

$$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = 3Nk = 3R, \text{ (при } N = N_A) \quad (3.15)$$

где $R = 8,31$ Дж/(моль·К) – газовая постоянная.

Выражение (3.15) – выражает закон Дюлонга – Пти: теплоемкость постоянна и не зависит от T .

Квантовая теория Дебая.

Исходные приближения модели Дебая:

- 1). Продольные и поперечные колебания имеют одинаковую скорость $v_s = v_t = v_l$ – скорость звука в твердом теле.
- 2). Закон дисперсии линеен во всей первой зоне Бриллюэна $\omega(q) = v_s|q|$.

Примеры решения задач

Задача 1. Получить выражение для тепловой энергии кристалла и его теплоемкости для случаев а). Высокие температуры $T \gg \theta_D$; б). Низкие температуры $T \ll \theta_D$. Сравнить с классическими результатами.

Решение

а) При высоких температурах $\frac{\theta_D}{T} \ll 1$, отсюда $x \ll 1$.

$$e^x \approx 1 + x + \dots$$

Из формулы (6.5) следует, что,

$$E = 9kNT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} =$$

$$9NkT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 dx}{1 + x - 1} = 9NkT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} x^2 dx = 3NkT,$$

$C_v = 3Nk$ - это классический результат Дюлонга - Пти. Таким образом, при высоких температурах ($T \gg \theta_D$) возбуждены все квантовые осцилляторы (имеются фононы любой энергии от 0 до $k\theta_D$) и на каждый фонон приходится в среднем энергия kT .

б) При низких температурах $T \ll \theta_D$, отношение $\frac{\theta_D}{T} \gg 1$, верхний предел в интеграле

(6.5) может быть заменен на бесконечность $E = 9NkT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{3\pi^4}{5} NkT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3$.

Тогда теплоемкость при постоянном объеме:

$$C_v = \frac{12}{5} \pi^4 kN \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \ll 3Nk.$$

Следовательно, при низких температурах число фононов с энергиями $\hbar\omega > kT$ ничтожно мало, то есть, возбуждаются лишь те осцилляторы (колебания), для которых $\hbar\omega < kT$. График зависимости $C_v(T)$ представлен на рисунке и хорошо согласуется с экспериментом.

Задача 2. Вычислить значение максимальной частоты в спектре колебаний в модели Дебая и оценить величины ω_D и θ_D , если скорость звука в твердом теле $v_s = 3 \cdot 10^3$ м/с, а постоянная решетки $a = 3 \cdot 10^{-10}$ м.

Решение

Полное число колебаний в кубическом кристалле из N атомов (по 1 в элементарной ячейке) равно $3N$ и равно числу соответствующих квантовых осцилляторов, то есть,

$$3N = \int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \omega^2 d\omega = \frac{V\omega_D^3}{2\pi^2 v_s^3}$$

Выразим максимальную частоту в спектре колебаний (частоту Дебая)

$$\omega_D = v_s \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}}, \text{ через тепловой эквивалент - температуру Дебая } \theta_D k = \hbar\omega_D.$$

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k} = \frac{\hbar v_s}{k} \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}}.$$

В случае кубической ячейки $V = Na^3$ и

$$\omega_D = \frac{v_s}{a} \sqrt[3]{6\pi^2} \approx \frac{3 \cdot 10^3}{3 \cdot 10^{-10}} \cdot 4 = 4 \cdot 10^{13} \frac{1}{\text{сек}}.$$

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 4 \cdot 10^{13}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \approx 300 \text{ К}$$

Ответ: $\omega_D = 4 \cdot 10^{13} \frac{1}{\text{сек}}$, $\theta_D \approx 300 \text{ К}$.

Задача 3. На нагревание металлического предмета массой 100г от 20⁰С до 50⁰С затрачено 8300Дж. Определить, из какого металла изготовлен предмет, если указанный интервал температур выше температуры Дебая.

Решение.

Согласно первому закону термодинамики

$$\Delta Q = c_{\text{уд}} m \Delta t. \quad (1)$$

Удельная теплоемкость $c_{\text{уд}}$ может быть выражена через молярную теплоемкость c_{Vm} и молярную массу материала M .

$$c_{\text{уд}} = \frac{c_{Vm}}{M} \quad (2)$$

Так как $T > \theta_D$ то

$$c_{Vm} = 3N_A k = 3R \quad (3)$$

Из формул (1), (2) и (3) легко найти выражение для молярной массы и, подставив численные значения, получим

$$M = \frac{3R m \Delta t}{\Delta Q} = \frac{3 \cdot 8,31 \cdot 0,1 \cdot 30}{8300} = 9 \cdot 10^{-3} \frac{\text{кг}}{\text{моль}}.$$

Ответ: согласно периодической системе Менделеева, такую молярную массу имеет бериллий.

Задачи для самостоятельного решения.

- 6.1 Вычислить удельные теплоемкости $C_{\text{уд}}$ кристаллов алюминия и меди по классической теории теплоемкости.
- 6.2 Пользуясь классической теорией, вычислить удельные теплоемкости $C_{\text{уд}}$ кристаллов NaCl и CaCl_2 .
- 6.3 Определить изменение ΔU внутренней энергии кристалла никеля при нагревании его от $t_1=0^{\circ}\text{C}$ до $t_2=200^{\circ}\text{C}$. Масса m кристалла равна 20г. Вычислить теплоемкость C .
- 6.4 Определить максимальную частоту ω_{max} собственных колебаний в кристалле золота по теории Дебая. Характеристическая температура $\theta_D=180 \text{ К}$.
- 6.5 Вычислить частоту Дебая ω_{max} , если известно, что молярная теплоемкость C_m серебра при $T=20\text{К}$. равна 1,7 Дж./ (моль К).
- 6.6 Пользуясь теорией теплоемкости Дебая, определить изменение ΔU_m молярной внутренней энергии кристалла при нагревании его от 0 до $T=0,1\theta_D$. Характеристическую температуру θ_D Дебая принять для данного кристалла равной 300К. Считать $T \ll \theta_D$.

- 6.7 Используя квантовую теорию теплоемкости Дебая, вычислить изменение ΔU_m молярной внутренней энергии кристалла при нагревании его на $\Delta T=2K$ от температуры $T=\theta_D/2$.
- 6.8 При нагревании серебра массой $m=10г$ от $T_1=10K$ до $T_2=20K$ было подведено $\Delta Q=0,71Дж$ теплоты. Определить характеристическую температуру θ_D Дебая серебра. Считать $T \ll \theta_D$.
- 6.9 Определить относительную погрешность, которая будет допущена при вычислении теплоемкости кристалла, если вместо значения, даваемого теорией Дебая (при $T=\theta_D$), воспользоваться значением, даваемым законом Дюлонга и Пти.

3.3 Зонная теория твердых тел.

Статистика носителей заряда в металлах и полупроводниках. Твердое тело – конгломерат атомов. Рассмотрим N удалённых друг от друга атомов на примере Na (рис. 14). При их сближении потенциальные барьеры, разделяющие их валентные электроны, перекрываются и уменьшаются по величине, образуя периодический потенциал кристаллической решетки. Теперь электроны взаимодействуют не только со ядром своего атома, но и соседнего. Валентные электроны, туннелируя через потенциальные барьеры, могут переходить от одного атома к другому. Это приводит к значительному уширению уровней энергии валентных электронов. Согласно соотношению неопределенностей, уширение валентного уровня составляет:

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\tau}, \quad (3.16)$$

где $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, $\tau = 10^{-15}$ с – время жизни валентного электрона, следовательно $\Delta E \approx 1$ эВ.

Кроме того, электростатическое взаимодействие N сближаемых атомов приводит к расщеплению N -кратно вырожденных уровней в зону.

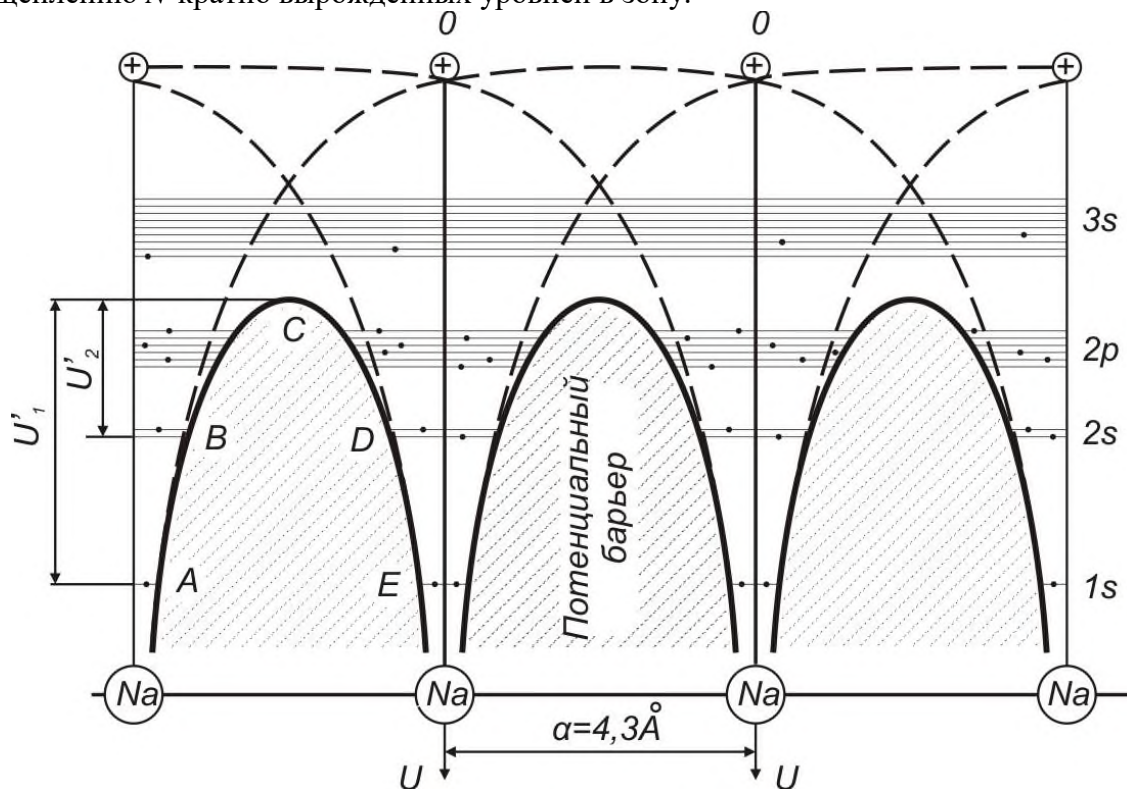


Рис. 14. Энергетическая схема атомов натрия, сближенных до расстояния, равного параметру решетки

Энергетический спектр в разрешенной зоне квазинепрерывный. Так как число электронов в твердом теле, конечно, то заполненными оказываются лишь несколько нижних зон. Последняя целиком, заполненная зона называется валентной зоной (ВЗ). Над ней, через полосу запрещенных значений энергии шириной E_g , располагается либо частично заполненная, либо совершенно пустая зона проводимости (ЗП). Случай, когда ЗП заполнена частично соответствует типичному металлу (рис.15).

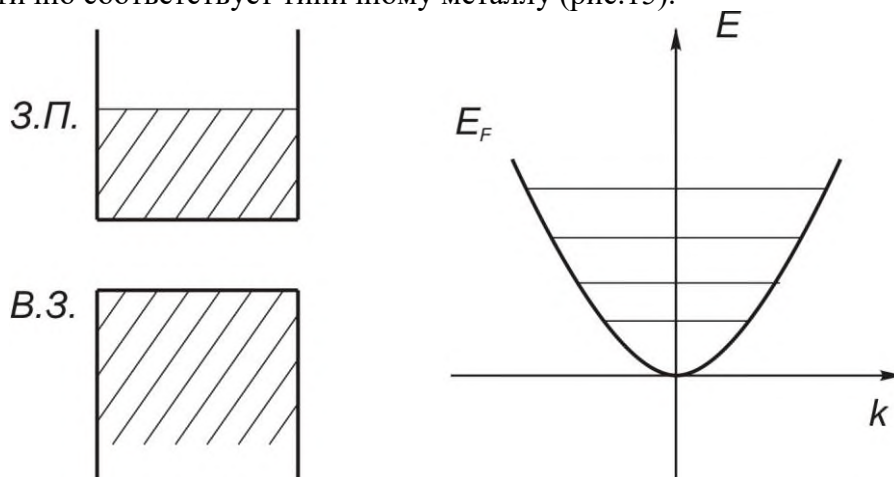


Рис. 15. Зонная структура металла

Если же ЗП пуста, мы имеем дело с диэлектриком (рис. 16).

Физическое отличие двух типов заполнения зон, особенно ярко проявляется при наличии электрического поля E . В случае металла: электроны из зоны проводимости, получая дополнительный импульс $\hbar dk$, перераспределяются по свободным уровням ЗП и возникает токовое состояние. В случае диэлектриков при $T=0K$ в ЗП электронов нет, а ВЗ целиком заполнена и перераспределение электронов невозможно. Чтобы возник электрический ток, необходимо сообщить электронам тепловую энергию kT (нагреть), достаточную для возбуждения электронов из ВЗ в ЗП.

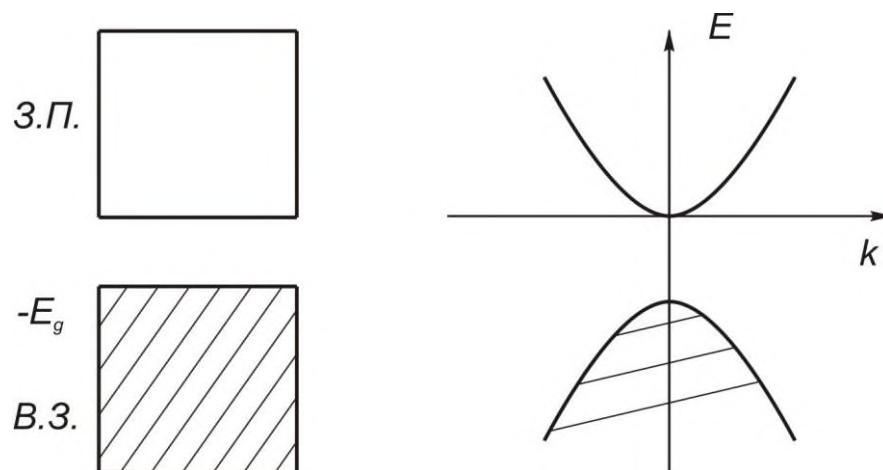


Рис. 16. Зонная структура диэлектрика

В зависимости от ширины запрещенной зоны E_g , отделяющей ЗП от ВЗ, диэлектрики делятся на изоляторы ($E_g > 3\text{эВ}$) и полупроводники ($E_g \leq 1\text{эВ}$).

Статистика электронов в металле.

Электрон, движущийся в кристалле, обладает не только кинетической энергией

$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, но и потенциальной энергией взаимодействия с периодическим полем

кристаллической решетки $U(\vec{k})$. Отличие закона дисперсии $E(\vec{k}) = E_k + U(\vec{k})$ от параболического, и появления запрещенных значений волнового вектора \vec{k} , учитывается введение эффективной массы:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}. \quad (3.17)$$

Тогда закон дисперсии электронов в кристалле можно записать в виде аналогичном закону дисперсии свободного электрона:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (3.18)$$

Ясно, что m^* сильно отличается от m для свободного электрона лишь вблизи границы зоны Бриллюэна $\left(|k| = \frac{\pi}{a}\right)$. Это позволяет для большинства рассматриваемых задач пользоваться моделью свободных электронов, которая хорошо развита. Если энергию отмерять от дна зоны проводимости, то плотность состояний в зоне проводимости.

$$g(E) = 4\pi V \left(\frac{2m^*}{h}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E}. \quad (3.19)$$

Эти состояния заполняются в соответствии с функцией распределения Ферми–Дирака.

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (3.20)$$

Полная статистическая функция имеет вид:

$$N(E) = g(E) f(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m^*)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (3.21)$$

Тогда концентрация носителей с энергией E в ЗП металла определяется соотношением:

$$n(E) = \frac{g(E) f(E)}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m^*)^{\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{E}}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (3.22)$$

Чтобы найти полную концентрацию электронов в ЗП, нужно проинтегрировать по всему спектру:

$$n = \int_0^{\infty} n(E) dE. \quad (3.23)$$

Энергия Ферми E_F , совпадающая при $T=0\text{K}$ с химическим потенциалом μ_0 связана с полной концентрацией n электронов проводимости выражением:

$$E_F = \frac{h^2}{2m^*} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \approx \mu_0. \quad (3.24)$$

Хим. потенциал при низких температурах описывается, формулой:

$$\mu(T) = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F}\right)^2 \right]. \quad (3.25)$$

С увеличением температуры хим. потенциал уменьшается и обращается в ноль при T_0 (рис. 17)

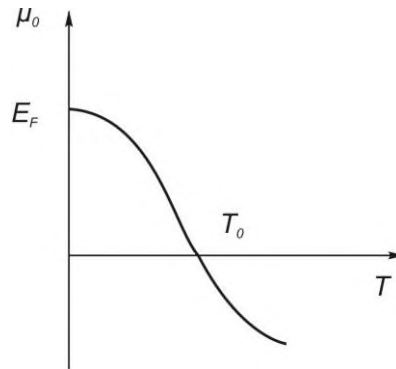


Рис.17. Поведение химического потенциала в металле.

Статистика электронов и дырок в полупроводнике.

В полупроводнике уровень, соответствующий химпотенциалу μ располагается вблизи середины запрещенной зоны, поэтому в распределении Ферми–Дирака $|E - \mu| \approx \frac{E_g}{2} \gg kT$, и полупроводник с широкой запрещенной зоной является невырожденным, т.е. электроны и дырки описываются статистикой Максвелла - Больцмана. Вероятность заполнения состояний в зоне проводимости электронами определяется формулой:

$$f_n(E) = e^{\frac{\mu - E}{kT}}, \text{ где } E > 0. \quad (3.26)$$

Вероятность заполнения состояний в валентной зоне дырками:

$$f_p(E) = e^{\frac{E - \mu}{kT}}, \text{ где } E < -E_g. \quad (3.27)$$

Вследствие теплового возбуждения через щель, шириной E_g в зоне проводимости появляются электроны, а в валентной зоне на их месте остаются дырки. Если энергию отмерять от дна зоны проводимости, то концентрация носителей заряда определяется выражениями:

$$n = N_c e^{\frac{\mu}{kT}}, \quad (3.28)$$

$$p = N_v e^{-\frac{\mu + E_g}{kT}}, \quad (3.29)$$

где $N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h} \right)^{\frac{3}{2}}$ – эффективное число состояний электронов, приведенных ко

дну зоны проводимости, $N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h} \right)^{\frac{3}{2}}$ – эффективное число состояний дырок,

приведенных к потолку валентной зоны.

Выражения (3.28) и (3.29) являются общими. Причем

$$n \cdot p = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}}. \quad (3.30)$$

К собственным полупроводникам относятся химически чистые полупроводники: Si, Ge, GaAs, InSb. Для собственных полупроводников характерно равенство концентраций электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне:

$$n_i = p = n = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}. \quad (3.31)$$

График температурной зависимости концентрации собственных носителей в чистом полупроводнике приведен на рисунке 18.

Хим. потенциал в собственном полупроводнике вблизи середины запрещенной зоны (рисунок 19):

$$\mu_i = -\frac{E_g}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \quad (3.32)$$

При $T=0\text{K}$; $\mu = -\frac{E_g}{2}$.

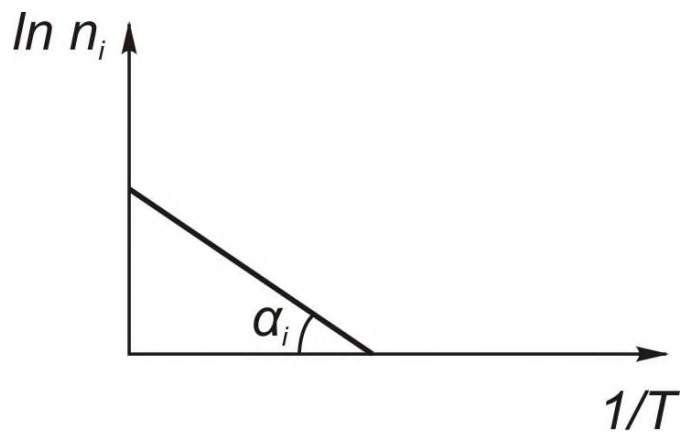


Рис. 18. Температурная зависимость концентрации собственных носителей в чистом полупроводнике

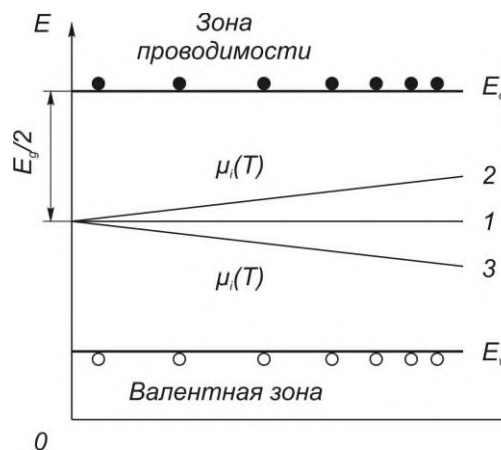


Рис. 19. Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике и изменение этого положения с температурой.

Донорные полупроводники (*n*-типа) образуются путем легирования четырехвалентного элемента (например Ge) пятивалентным (например As) (рис. 20). Основными носителями являются электроны, а неосновными – дырки.

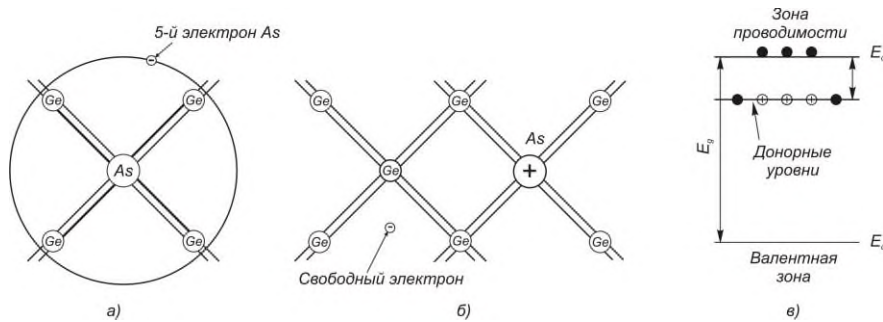


Рис. 20. Возбуждение носителей заряда в n-полупроводниках: а) при абсолютном нуле атомы мышьяка в решетке германия находятся в неизолрированном состоянии; б) ионизация атома мышьяка и образование «примесных» электронов проводимости при $T > 0$ К; в) энергетические уровни пятых электронов мышьяка, представляющие собой донорные уровни.

Температурная зависимость концентрации разбивается на три характерных интервала.

1) Область слабой ионизации $0 < T < T_s$. Электроны в зоне проводимости появляются только за счет тепловой ионизации доноров

$$n = \sqrt{N_d N_c} e^{-\frac{E_d}{2kT}}, \quad (3.33)$$

где N_d – концентрация доноров.

$$\mu = -\frac{E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_d}{N_c}, \quad (3.34)$$

где E_d – энергия ионизации доноров.

2) Область истощения примеси ($T_s < T < T_i$). Все донорные электроны заброшены в зону проводимости.

$$n = N_d \quad (3.35)$$

$$\mu = kT \ln \frac{N_d}{N_c} \quad (3.36)$$

Температура истощения примеси:

$$T_s = \frac{E_d}{k \ln \left(\frac{2N_c}{N_d} \right)} \quad (3.37)$$

3) Область собственной проводимости ($T > T_i$). Концентрации электронов и дырок определяется в основном тепловым возбуждением через щель E_g . Температура перехода к собственной проводимости.

$$T_i = \frac{E_g}{k \ln \frac{N_v N_c}{N_d^2}} \quad (3.38)$$

Концентрация и хим. потенциал определяется формулами (6) и (7). График зависимости логарифма концентрации от обратной температуры (рис. 21)

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{E_d}{2k}; \quad \operatorname{tg} \alpha_i = \frac{E_d}{2k}$$

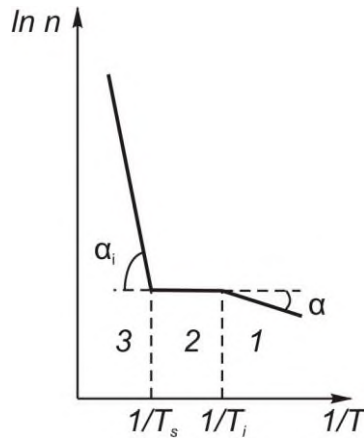


Рис. 21. Изменение концентрации электронов в зоне проводимости с температурой

В акцепторных полупроводниках (*p*-типа) основными носителями являются дырки, а неосновными – электроны (рис. 22). Аналогично донорным полупроводникам, в акцепторных также имеется 3 температурных интервала.

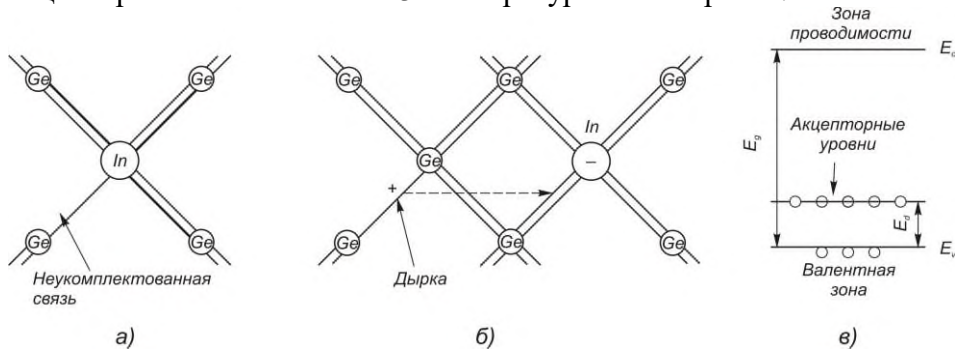


Рис. 22. Возбуждение носителей заряда в примесных *p*-полупроводниках: а) атомы трехвалентного индия в решетке германия при $T=0$ К. Четвертая связь атома индия не укомплектована; б) при $T>0$ К электроны могут переходить на неукомплектованные связи примесных атомов, приводя к образованию иона индия и незаполненного уровня (дырки) в валентной зоне германия; в) энергетические уровни неукомплектованных связей примесных атомов представляют собой акцепторные уровни, переход электронов на акцепторные уровни при $T>0$ К приводит к образованию дырок в валентной зоне

1) Область слабой ионизации

$$p = \sqrt{N_V N_A} e^{-E_A/2kT} \quad (3.39)$$

$$\mu = -E_g + \frac{E_A}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_A}{N_V} \right) \quad (3.40)$$

где N_A – концентрация акцепторов, E_A – энергия ионизации акцепторов Область истощения примеси:

$$\mu = -E_g - kT \ln \frac{N_A}{N_V} \quad (3.41)$$

$$T_S = \frac{E_A}{k \ln \left(\frac{2N_V}{N_A} \right)} \quad (3.42)$$

2) Область собственной проводимости характеризуется температурой:

$$T_i = \frac{E_g}{k \ln \left(\frac{N_C N_V}{N_A^2} \right)} \quad (3.43)$$

Концентрация и химический потенциал определяется формулами 6 и 7.

В полупроводниках, содержащих одновременно донорную и акцепторную примеси, донорного уровня на акцепторный.

В невырожденных примесных полупроводниках выполняется закон действующих масс:

$$n \cdot p = n_i^2 \quad (3.44)$$

Примеры решения задач.

Задача 1. Какая приблизительно доля электронов зоны проводимости металла находится в возбужденных состояниях при температуре плавления. Численную оценку сделать для Бериллия: $E_F=12\text{эВ}$, $T_{пл.}=1280\text{К}$.

Решение

При $T=0\text{К}$ все электроны заполняют состояния $E < E_F$, их концентрация зависит от E

$$\text{по закону: } n_0(E) = \begin{cases} 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} & ; E < E_F \\ 0 & ; E > E_F \end{cases}$$

Полная концентрация электронов в Зоне Проводимости (З.П.)

$$n = \int_0^{\infty} n_0(E) dE = 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^{E_F} E^{1/2} dE$$

При повышении температуры электроны из слоя kT возбуждаются в состояния с $E > E_F$. Концентрация возбужденных электронов при $T=T_{пл.}$

$$n_g = \int_{E_F}^{\infty} n(E) dE = 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} \int_{E_F}^{\infty} \frac{E^{1/2} dE}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$

Чтобы оценить величину химического потенциала μ при $T=T_{пл.}$, оценим отношение:

$$\frac{kT_{пл.}}{E_F} \text{ из уравнения } \mu = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]$$

$$\frac{kT_{пл.}}{E_F} = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 1280}{12 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \sim 10^{-2} \ll 1.$$

Следовательно, можно считать, что $\mu \approx E_F$ даже при $T=T_{пл.}$ Доля электронов, возбужденных при $T=T_{пл.}$

$$\nu = \frac{n_g}{n} \approx \frac{\int_{E_F}^{\infty} \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} dE}{\int_0^{E_F} E^{1/2} dE} = \frac{\int_{E_F}^{\infty} \sqrt{E} \cdot e^{-\frac{(E-E_F)}{kT}} dE}{\frac{2}{3} E_F^{3/2}}$$

В выражении $e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1$ для $E > E_F$ можно пренебречь 1 в силу резкой экспоненциальной зависимости первого слагаемого, тогда

$$\nu = \frac{3e^{E_F/kT}}{E_F^{3/2}} \int_{E_F}^{\infty} E^{1/2} e^{-\frac{E}{kT_{nl}}} dE \approx \frac{3}{2E_F} e^{\frac{E_F}{kT_{nl}}} \int_{E_F}^{\infty} e^{-\frac{E}{kT}} dE = \frac{3kT_{nl}}{E_F} \approx \frac{3}{2} \cdot \frac{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 1280}{12 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} = 1.4 \cdot 10^{-2}$$

Ответ: $\nu = 1.4 \cdot 10^{-2}$.

Задача 2. Найти минимальную энергию, необходимую для образования пары электрон-дырка в чистом теллуре, если известно, что концентрация носителей в нем возрастает в 5,2 раза при увеличении температуры от $T_1=300\text{К}$ до $T_2=400\text{К}$.

Решение

Концентрация носителей заряда в собственном полупроводнике при температуре T определяется соотношением $n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}$.

Таким образом, отношение концентраций при $T=T_1$ и $T=T_2$ есть

$$\frac{n_2(T_2)}{n_1(T_1)} = \sqrt{\frac{T_2^3}{T_1^3}} \cdot e^{\frac{E_g}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)}$$

Выразим E_g :

$$E_g = \frac{2k}{\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)} \cdot \ln \left[\frac{n_2(T_2)}{n_1(T_1)} \cdot \sqrt{\frac{T_2^3}{T_1^3}} \right].$$

Подставим числовые данные:

$$E_g = \frac{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}}{\left(\frac{1}{300} - \frac{1}{400} \right)} \cdot \ln \left[5,2 \cdot \left(\frac{3}{4} \right)^{3/2} \right] = 0,35 \text{ эВ.}$$

Ответ: $E_g = 0,35$ эВ.

Задача 3. В полупроводнике, в котором все донорные и акцепторные атомы ионизированы, выразить концентрации электронов и дырок, через концентрации донорных N_D и акцепторных N_A примесей и концентрацию собственных носителей n_i . Обсудить явление примесной компенсации.

Решение

Зонная схема рассматриваемой задачи приведена на рисунке. Все электроны с донорного уровня перешли в зону проводимости, все дырки с акцепторного – в валентную зону. Обозначим концентрацию электронов в зоне проводимости через n , а дырок в валентной зоне через p . Согласно условию электронейтральности суммарный заряд носителей в полупроводнике должен равняться 0.

$$eN_p - eN_n = 0,$$

где N_p и N_n – полные концентрации дырок и электронов. Отсюда с учетом того, что $N_p = p + N_D$, а $N_n = N_A + n$, получим:

$$p + N_D - n - N_A = 0, \quad (1)$$

Второе уравнение, связывающее n и p следует из закона действующих масс:

$$n p = n_i^2, \quad (2)$$

В результате совместного решения уравнений (1) и (2) получаем:

$$n = \frac{N_D - N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - N_A}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

$$p = \frac{N_A - N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - N_A}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

Знак перед радикалом выбран так, чтобы при $N_D = N_A = 0$, концентрация носителей заряда $n = p = n_i$ – собственный полупроводник. Заметим, что случаи $N_D = N_A = 0$ и $N_D = N_A \neq 0$ совершенно тождественны, в обоих случаях $n = p = n_i$. Последний случай $N_D = N_A \neq 0$ соответствует примесной компенсации, когда сколько электронов возбуждается с донорного уровня в зону проводимости, столько же оказывается в связанном состоянии на акцепторном уровне и эффективная концентрация носителей, участвующих в проводимости $n = p = n_i$. Таким образом, для получения собственных полупроводников вместо очистки их от примесей можно использовать легирование компенсирующей примесью.

Задачи для самостоятельного решения.

- 7.1 Оценить температуру вырождения для калия, приняв, что на каждый атом, приходится по 1 свободному электрону, $\rho = 860 \text{ кг/м}^3$.
- 7.2 Определить число свободных электронов, которое приходится на один атом в *Na*, если $E_F = 3,12 \text{ эВ}$, $\rho = 970 \text{ кг/м}^3$.
- 7.3 Найти расстояние между соседними уровнями энергии вблизи энергии Ферми в модели свободных электронов для *Cu*, если объем $V = 1 \text{ см}^3$, $n = 8 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$.
- 7.4 Найти суммарную кинетическую энергию свободных электронов в меди при $T = 0 \text{ К}$. Данные взять из предыдущей задачи.
- 7.5 Найти положение уровня, соответствующий хим. потенциалу и рассчитать концентрации n_i в собственном невырожденном полу проводнике при $T = 300 \text{ К}$:
 - а) *Ge*: $E_g = 0,66 \text{ МэВ}$, $m_n^* = 0,56m$, $m_p^* = 0,37m$
 - б) *GaSb*: $E_g = 0,8 \text{ МэВ}$, $m_n^* = 0,047m$, $m_p^* = 0,23m$
 - в) *InSb*: $E_g = 0,22 \text{ МэВ}$, $m_n^* = 0,013m$, $m_p^* = 0,40m$
 - г) *GaAs*: $E_g = 1,43 \text{ МэВ}$, $m_n^* = 0,068m$, $m_p^* = 0,5m$
- 7.6 Рассчитать изменение концентраций электронов в собственном невырожденном полу проводнике при изменении температуры от 200 К до 300 К, если ширина запрещенной зоны $E_g = 0,8 \text{ эВ}$.
- 7.7 Вычислить ширину запрещенной зоны E_g и химический потенциал μ собственного полу проводника при $T = 300 \text{ К}$, концентрацией электронов проводимости $n_i = 1,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$, если известно, что произведение эффективных плотностей состояний, приведенных, соответственно, к дну зоны проводимости и потолку валентной зоны равно $N_c N_v = 6,25 \cdot 10^{48} \text{ м}^{-6}$.
- 7.8 В чистом германии ширина запрещенной зоны равна 0,66 эВ. На сколько надо повысить температуру полу проводника по сравнению с 300 К, чтобы число электронов проводимости удвоилось.

- 7.9 Вычислить положение уровня химического потенциала μ относительно дна зоны проводимости в полупроводнике при $T=300$ К, а также концентрации основных и неосновных носителей для:
- Si* легированный *P* с $N_D=10^{21}\text{м}^{-3}$.
 - Ge* легированный *As* с $N_D=10^{22}\text{м}^{-3}$.
 - Si* легированный *As* с $N_D=10^{22}\text{м}^{-3}$.
 - Ge* легированный *Sb* с $N_D=10^{23}\text{м}^{-3}$.
 - Si* легированный *Sb* с $N_D=10^{23}\text{м}^{-3}$.
 - Ge* легированный *P* с $N_D=10^{21}\text{м}^{-3}$.
- 7.10 Всё как в 7.9, кроме относительно потолка валентной зоны ;
- Si* легированный *B* с $N_A=10^{20}\text{м}^{-3}$.
 - Ge* легированный *Al* с $N_A=10^{21}\text{м}^{-3}$.
 - Si* легированный *Al* с $N_A=10^{21}\text{м}^{-3}$.
 - Ge* легированный *Ga* с $N_A=10^{22}\text{м}^{-3}$.
 - Si* легированный *Ga* с $N_A=10^{22}\text{м}^{-3}$.
 - Ge* легированный *In* с $N_A=10^{23}\text{м}^{-3}$.
- 7.11 При какой концентрации фосфора *P*, кремний *Si* становится вырожденным полупроводником, тоже самое для *Ge*, легированного *B*.

3.4. Электропроводность твердых тел

1. Электропроводность металлов

При отсутствии внешнего электрического поля электроны в зоне проводимости находятся в непрерывном движении, причем движения в прямом и обратном направлениях компенсируются, и функция распределения симметрична (рис. 23а). Под действием электрического поля все электроны получают одинаковые приращения к скорости хаотического движения и функция распределения становится несимметричной относительно $f(k)$ (рис. 23(б)), отражая направленный перенос заряда под действием силы

$$\vec{F}_\varepsilon = -e\vec{\varepsilon}. \quad (3.45)$$

Из-за рассеяния электронов на дефектах решетки возникает сила сопротивления среды

$$\vec{F}_{cc} = -m^*\vec{V} \frac{1}{\tau}, \quad (3.46)$$

где \vec{V} - скорость, сообщаемая электронам полем, а $\frac{1}{\tau}$ - частота столкновений. Когда силы \vec{F}_{cc} и \vec{F}_ε сравниваются наступает стационарное токовое состояние, характеризующееся дрейфовой скоростью \vec{V}_D , направленной против электрического поля $\vec{\varepsilon}$.

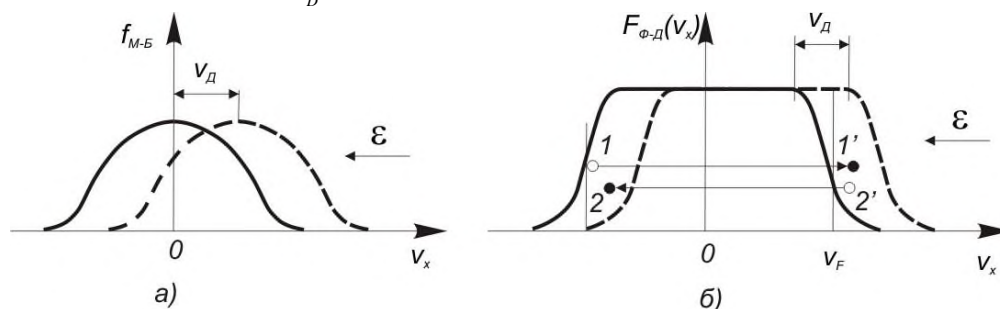


Рис. 23. Функции распределения электронов по скоростям для невырожденного (а) и

вырожденного (б) электронного газа

$$\vec{V}_D = -\frac{e\tau}{m^*} \cdot \vec{\mathcal{E}}. \quad (3.47)$$

Коэффициент пропорциональности в (1) называется подвижностью электронов

$$u = e\tau / m^*. \quad (3.48)$$

Подвижность – мера несвободы электронов и определяется временем свободного пробега τ . Плотность электрического тока в металле, дается выражением

$$\vec{j} = -ne\vec{V}_D. \quad (3.49)$$

Подставляя сюда выражение (1) для V_D :

$$\vec{j} = \frac{ne^2\tau}{m^*} \vec{\mathcal{E}} = \sigma \vec{\mathcal{E}}. \quad (3.50)$$

Закон Ома в дифференциальной форме. Коэффициент пропорциональности между \vec{j} и $\vec{\mathcal{E}}$ в (3) называется удельной электропроводностью σ и может быть выражен через подвижность

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} = neu. \quad (3.51)$$

Величина, обратная σ называется удельным электросопротивлением:

$$\rho = \frac{m^*}{ne^2} \cdot \frac{1}{\tau}. \quad (3.52)$$

При низких температурах $\rho = \rho_0$ и не зависит от T и определяется рассеянием на примесях. С повышением T основной вклад в электросопротивление идет от рассеяния электронов на тепловых колебаниях решетки – фононах:

$$\rho = \rho_0 + aT^5 + bT. \quad (3.53)$$

2. Электропроводность полупроводников

В полупроводниках, где существуют 2 типа носителей заряда, электрический ток переносится электронами в зоне проводимости и дырками в валентной зоне. Поэтому полная электропроводность является суммой электронной и дырочной компонент

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = enu_n + p u_p, \quad (3.54)$$

где $u_n = \frac{e n \tau_n}{m_n^*}$ и $u_p = \frac{e p \tau_p}{m_p^*}$ - соответственно подвижности электронов и дырок, а τ_n , m_n и

τ_p , m_p – соответствующие времена свободного пробега и эффективные массы.

При низких температурах подвижность определяется целиком рассеянием носителей заряда на ионах примесей и $u_{n,p} \sim T^{3/2}$, а при высоких температурах основным механизмом электросопротивления является рассеяние на фононах и $u_{n,p} \sim T^{-3/2}$. (рис. 24)

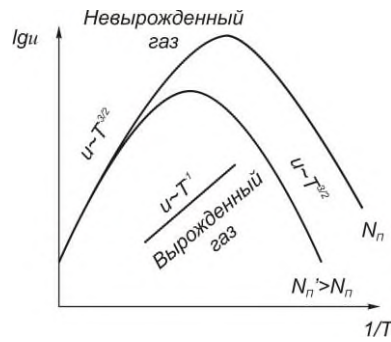


Рис. 24. Зависимость подвижности носителей в полупроводниках от температуры (теоретические кривые; схематично).

3. Собственная проводимость полупроводников

В химически чистых (собственных) полупроводниках концентрации электронов и дырок одинаковы $n=p=n_i$. Потому:

$$\sigma_i = en_i(u_n + u_p) = e\sqrt{N_c N_v}(u_n + u_p)e^{-E_g/2kT} = \sigma_{oi}e^{-E_g/2kT}. \quad (3.55)$$

Таким образом, слабая степенная зависимость N_c , N_v , u_n , u_p , от температуры на практике не проявляется на фоне резкой экспоненциальной зависимости концентрации от T . Поскольку с повышением T растет концентрация носителей заряда, то и проводимость полупроводников увеличивается с ростом температуры. Этим полупроводники резко отличаются от металлов, у которых концентрация носителей постоянна, а подвижность с увеличением температуры падает, а следовательно и электропроводность падает.

4. Примесная проводимость полупроводников

В примесных полупроводниках температурная зависимость электропроводности, также в основном определяется зависимостью от концентрации носителей заряда. Рассмотрим к примеру проводимость донорного полупроводника в 3^x разных температурных интервалах:

1) $0 < T < T_s$. Область слабой ионизации.

Проводимость полупроводника чисто электронная и определяется частичной ионизацией донорных примесей:

$$\sigma_n = enu_n = e\sqrt{N_D N_c}u_n e^{\frac{E_D}{2kT}} = \sigma_{no} e^{\frac{E_D}{2kT}}. \quad (3.56)$$

2) $T_s < T < T_i$ Область истощения примеси.

В области истощения примеси (полная ионизация доноров) $n = N_D = const$ и σ_n зависит от температуры аналогично подвижности:

$$\sigma_n = eN_D u_n. \quad (3.57)$$

3) $T > T_i$ Область собственной проводимости.

Основную роль при переносе заряда при столь высоких температурах начинают играть собственные носители, появляющиеся за счёт теплового возбуждения электронов из валентной зоны в зону проводимости. Теперь $n=p=n_i$ и, следовательно:

$$\sigma = \sigma_i = \sigma_{oi} e^{-\frac{E_g}{2kT}}. \quad (3.58)$$

Графическое изображение рассмотренной зависимости предоставлено на рисунке 25. Аналогично выглядит зависимость $\sigma(T)$ в случае акцепторного полупроводника, где основные носители заряда являются дырки в валентной зоне.

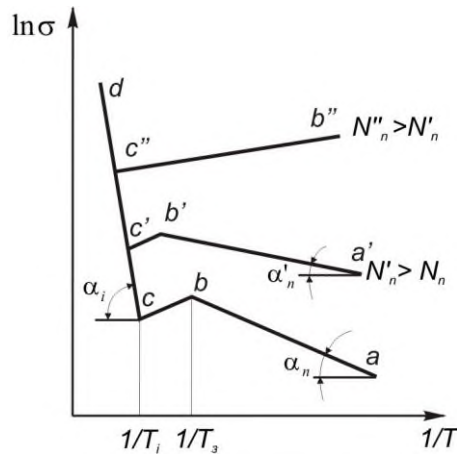


Рис. 25. Зависимость электропроводности примесных полупроводников от температуры (теоретические кривые; схематично).

5.Эффект Холла в металлах и полупроводниках

Эффектом Холла называется явление, состоящее в возникновении поперечной разности потенциалов при пропускании тока вдоль проводящей пластины, помещённой в магнитное поле, перпендикулярно её поверхности.

Напряжённость поперечной поля ε_H (поля Холла) пропорциональна произведению плотностей тока \vec{j} , текущей по проводнику и величине магнитной индукции \vec{B}

$$\vec{\varepsilon}_H = R_H \vec{j} \vec{B} \quad (3.59)$$

Коэффициент пропорциональности в (1) называется постоянной Холла:

$$R_H = \frac{\varepsilon_H}{jB} = \frac{U_H b}{IB}, \quad (3.60)$$

где U_H -Холловская разность потенциалов; I -сила тока протекающая по пластине; b -толщина пластины;

А) В случае электронной проводимости $R_H = -\frac{1}{ne}$, где n -концентрация электронов.

Постоянная Холла в этом случае отрицательна.

В) В случае дырочной проводимости $R_H = \frac{1}{pe}$, где p -концентрация дырок $R_H > 0$.

С) В полупроводниках со смешанной проводимостью.

$$R_H = \frac{A}{e} \frac{p u_p^2 - n u_n^2}{(p u_p - n u_n)^2}, \quad (3.61)$$

где u_n и u_p - соответственно подвижность электронов и дырок; n и p - концентрации электронов и дырок; A -константа. $A=1,17$, если рассеивание происходит на фононах; $A=1,93$, если рассеивание происходит на примесях;

В собственных полупроводниках, где $n \approx p = n_i$.

$$R_H = \frac{A}{n_i e} \frac{u_p - u_n}{u_p + u_n} \quad (3.62)$$

Постоянная Холла отрицательная, так как обычно подвижность электронов выше, чем подвижность дырок.

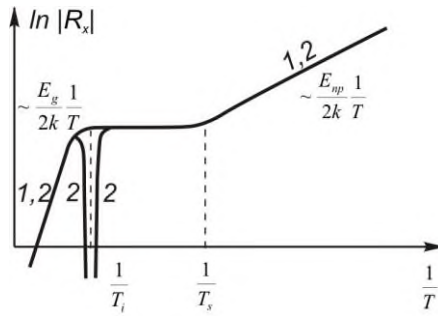


Рис. 26. Зависимость постоянной Холла для полупроводников n -типа (кривая 1) и p -типа (кривая 2) от температуры

Примеры решения задач

Задача 1. Рассчитать дрейфовую скорость электронов проводимости в серебре, если его удельное электросопротивление $\rho = 1,54 \cdot 10^{-8}$ Ом·м, а концентрация электронов проводимости $n = 5,8 \cdot 10^{28}$ м⁻³, напряженность электрического поля ε принять равной 100 В/м.

Решение

По определению дрейфовая скорость

$$v_D = u \varepsilon \quad (1)$$

Подвижность u может быть найдена из выражения для удельного сопротивления:

$$\rho = \frac{1}{n e u} \quad (2)$$

Следовательно:

$$v_D = \frac{\varepsilon}{\rho n e} = \frac{100}{1,54 \cdot 10^{-8} \cdot 5,8 \cdot 10^{28} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 0,7 \text{ м/с.}$$

Ответ: $v_D = 0,7$ м/с.

Задача 2. Найти минимальную энергию, необходимую для образования пары электрон – дырка в кристалле GaAs, если его электропроводность изменяется в 10 раз при понижении температуры от 20⁰С до -3⁰С.

Решение

Проводимость собственных полупроводников зависит от температуры T в соответствии с формулой

$$\sigma_i(T) = \sigma_{oi} e^{\frac{E_g}{2kT}} \quad (1)$$

И уменьшается с понижением температуры. Считая, что $T_1 = 293$ К и $T_2 = 270$ К, получим

$$\frac{\sigma(T_1)}{\sigma(T_2)} \approx e^{\frac{E_g}{2k} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)} = 10 \quad (2)$$

Логарифмируя выражение (2), получим:

$$E_g = \frac{2 k T_1 T_2}{T_1 - T_2} \ln 10 = \frac{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 293 \cdot 270 \cdot 2,3}{23} = 2,2 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 1,3 \text{ эВ.}$$

Ответ: $E_g = 2,2 \cdot 10^{-19}$ Дж = 1,3 эВ.

Задача 3. Удельное сопротивление меди, содержащей 0,3 ат.% олова при температуре 300К, составляет 0,0258 мкОм·м. Определить отношение β удельных сопротивлений меди при температурах $T_1=300\text{К}$ и $T_2=4.2\text{К}$

Решение

Согласно правилу Маттисена: $\rho = \rho_{\text{ост}} + \rho_T$, где ρ_T – сопротивление, обусловленное рассеиванием электронов на тепловых колебаниях решётки; $\rho = \rho_{\text{ост}} + \rho_T$ – остаточное сопротивление, связанное с рассеянием на неоднородностях структуры.

Для чистой меди $\rho \approx \rho_T$. При $T=300\text{К}$ $\rho_T=0.0168$ мкОм·м. Вблизи температуры абсолютного нуля полное сопротивление реального металлического проводника равно остаточному сопротивлению. Отсюда следует, что:

$$\beta = \frac{\rho_{300}}{\rho_{4.2}} = \frac{\rho_{300}}{\rho_{\text{ост}}} = \frac{\rho_{300}}{\rho_{300} - \rho_T} = \frac{0,0258}{0,0258 - 0,0168} = 2,87.$$

Ответ: $\beta = 2,87$.

Задача 4. Вычислить разность подвижностей электронов и дырок в чистом беспримесном германии, если известно, что в магнитном поле $B=0,3\text{Тл}$, отношение поперечной (холловской) напряженности электрического поля ε_H к продольной ε равно 0,06.

Решение

По определению постоянная Холла равна

$$R_H = \frac{\varepsilon_H}{jB} = \frac{\varepsilon_H}{\varepsilon} \cdot \frac{1}{\sigma_i B}, \quad (1)$$

где мы воспользовались законом Ома $j = \sigma_i \varepsilon$ и σ_i – проводимость собственного полупроводника. С другой стороны, в случае собственного полупроводника

$$R_H = \frac{A}{en_i} \cdot \frac{u_p - u_n}{u_p + u_n} = \frac{A}{\sigma_i} (u_p + u_n), \quad (2)$$

так, как $\sigma_i = n_i e (u_p + u_n)$. Приравняв правые части (1) и (2) получим для разности подвижностей следующее выражение:

$$u_p - u_n = \frac{1}{A \cdot B} \cdot \frac{\varepsilon_H}{\varepsilon} = \frac{0,06}{A \cdot 0,3} = \frac{0,2}{A} \frac{\text{м}^2}{\text{В} \cdot \text{с}} \quad (3)$$

В случае, когда подвижность определяется рассеянием на фононах $A=1,17$

$$u_p - u_n = 0,17 \frac{\text{м}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$$

Если же подвижность определяется рассеянием на заряженных примесях, то $A=1,93$

$$u_p - u_n = 0,10 \frac{\text{м}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$$

Задачи для самостоятельного решения.

- 8.1 Найти отношение дрейфовой скорости V_D электронов в Cu в электрическом поле $\varepsilon = 100 \text{ В/м}$ к скорости V_F если, $E_F = 7 \text{ эВ}$, $\tau = 2 \cdot 10^{-14} \text{ с}$.
- 8.2 Вычислить время свободного пробега τ , длину свободного пробега l и подвижность электронов в Cu если, концентрация электронов $n = 8,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ и удельное сопротивление $\rho = 1,6 \cdot 10^{-8} \text{ Ом} \cdot \text{м}$. Сравнить полученное значение l с расстоянием между соседними атомами в Cu .

- 8.3 Определить теплопроводность меди при $T=0^{\circ}\text{C}$, если число Лоренца $L=2,23 \cdot 10^{-8}$ (Вт·Ом)·К². Электропроводность σ из предыдущей задачи.
- 8.4 Вычислить дрейфовую скорость электронов и дырок в германии при $T=300\text{K}$ в поле напряженностью 10^3В/м . Необходимые для расчета данные взять в таблице 1.
- 8.5 Кристалл собственного кремния находится при $T=300\text{K}$. На сколько процентов увеличиться его удельная электропроводность при повышении температуры на 1%. Для сравнения решить аналогичную задачу для германия.
- 8.6 Вычислить температурный коэффициент сопротивления $T_{k\rho} = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$ для собственных германия и кремния при $T=300\text{K}$. Сравнить их между собой.
- 8.7 Для чистого теллура температурный коэффициент сопротивления при $T=200\text{K}$, $T_{k\rho}=-0,0493\text{K}^{-1}$. Определить ширину запрещенной зоны теллура.
- 8.8 Вычислить удельное электросопротивление германия p - типа при концентрации $\rho=3 \cdot 10^{20}\text{ м}^3$ и температуре $T=300\text{K}$. Необходимые для расчета данные взять в таблице №1.
- 8.9 Определить концентрацию дырок и электронов в германии p - типа при $T=300\text{K}$, если его удельная электропроводность равна $\sigma=10^4$ (1/Ом·м). Необходимые для расчета данные взять в таблице №1.
- 8.10 Образец германия содержит в качестве примеси фосфор P с концентрацией $N=2 \cdot 10^{20}\text{ м}^{-3}$. Определить удельное электросопротивление и тип полупроводника при $T=300\text{K}$. Необходимые данные взять в таблицах №1,2.
- 8.11 Определить удельную электропроводность образца кремния при $T=300\text{K}$, если концентрация акцепторов $N_A=2,3 \cdot 10^{19}\text{ м}^{-3}$, концентрация доноров $N_D=2,2 \cdot 10^{19}\text{ м}^{-3}$.
- 8.12 Вычислить энергию активизации донорных атомов в полупроводнике n - типа, если известно. Что подвижность электронов $u_n=0,05$ (м²/Вс), концентрация доноров $N_D=5 \cdot 10^{23}\text{ м}^{-3}$ и удельное сопротивление при $T=50\text{K}$ равно $\rho=1,5 \cdot 10^{-3}$ Ом·м.
- 8.13 При температуре $T=300\text{K}$ некоторый образец германия n - типа имеет удельное сопротивление $\rho=0,015$ Ом·м и постоянную Холла $R_H=0,007\text{ м}^3/\text{Кл}$. Найти:
- Концентрацию и подвижность электронов проводимости,
 - Их среднюю длину свободного пробега.
- 8.14 Пластинку из полупроводника p - типа, шириной $a=1\text{см}$ и длиной $l=5\text{см}$ поместим в магнитное поле $B=0,5\text{Тл}$. К концам пластинки приложим постоянное напряжение $U=10\text{В}$. При этом Холловская разность потенциалов оказалась равной $U_H=0,05\text{В}$. Удельное электросопротивление пластинки $\rho=0,025$ Ом·м. Найти постоянную Холла, концентрацию и подвижность дырок.
- 8.15 В некотором образце германия, у которого подвижность электронов в 2,1 раза больше подвижности дырок, эффект Холла не наблюдается. Найти для этого образца:
- Отношение концентрации электронов и дырок,
 - Какая часть электропроводности обусловлена электронами?

3.5 Контактные явления в твердых телах.

Контакт двух металлов.

Электронный газ в металле есть система частиц в потенциальной яме. Работа выхода есть разность между высотой барьера на границе металл- вакуум (U) и химическим потенциалом (μ).

$$A = U - \mu. \quad (3.63)$$

При приведении металлов в контакт электроны из металла 1 станут переходить в металл 2. При этом, создается внутреннее электрическое поле в области контакта и соответствует внутренней разности потенциалов.

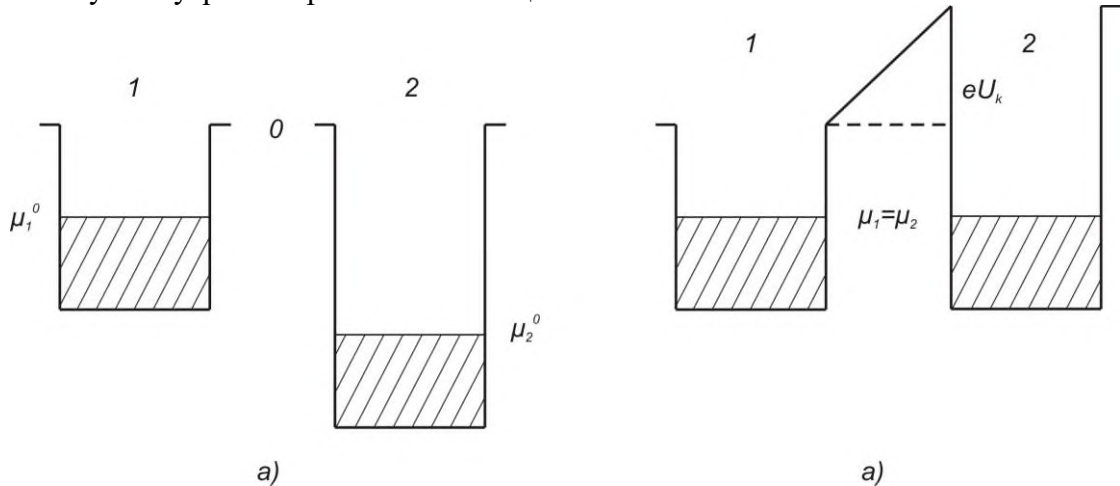


Рис. 27. Зонная структура металл-металл: а) до приведения в контакт; б) после установления контактной разности потенциалов.

Дальнейшее перетекание электронов из первого металла во второй требует совершения работы $A = Ue$, которая переходит в потенциальную энергию и уровни энергии металла 1:

$$E_1 = E_1^0 - \frac{eU}{2}$$

опускаются, а уровни металла 2 поднимаются.

$$E_2 = E_2^0 + \frac{eU}{2}$$

Процесс смещения заканчивается, когда уровни химических потенциалов совпадут $\mu_1 = \mu_2$. Устанавливается динамическое равновесие, при котором число переходов электронов из 1 в 2 равно числу переходов из 2 в 1. Это соответствует установлению контактной разности потенциалов:

$$eV_k = A_2 - A_1 = \mu_1^0 - \mu_2^0.$$

Емкость перехода $C = \frac{\epsilon\epsilon_0}{d} S$, где d - толщина перехода, S - площадь перехода, $d \sim a \sim 3 \div 5 \text{ \AA}$.

Контакт металл- полупроводник

Рассмотрим контакт полупроводника с металлом на рис 28(а,б) показана энергетическая схема металла (М) и полупроводника (П) донорного типа до установления равновесия.

Установление равновесия между металлом и полупроводником происходит путем обмена электронами т.к. химпотенциал в п/пр расположен выше, чем в металле, то поток электронов из полупроводника будет в начальный момент преобладать над потоком из металла, вследствие чего металл начнет заряжаться отрицательно, а полупроводник – положительно. Равновесие достигается при условии выравнивание химпотенциалов и сопровождается возникновением потенциального барьера

$$\varphi_0 = e \cdot V_k = \mu_n - \mu_m. \quad (3.64)$$

для электронов, идущих из полупроводника в металл. Отличие рассматриваемого случая контакта двух металлов состоит в том, что полупроводник имеет, как правило, значительно меньшую концентрацию свободных электронов, чем металл, вследствие чего толщина слоя полупроводника, из которого уходят электроны, может оказаться во много раз большей, чем в металле. Как и в случае контакта двух металлов, контактное полу будет практически полностью локализоваться в двойном электрическом (запорном) слое d_{II} . Этот случай показан на рис 28(г).

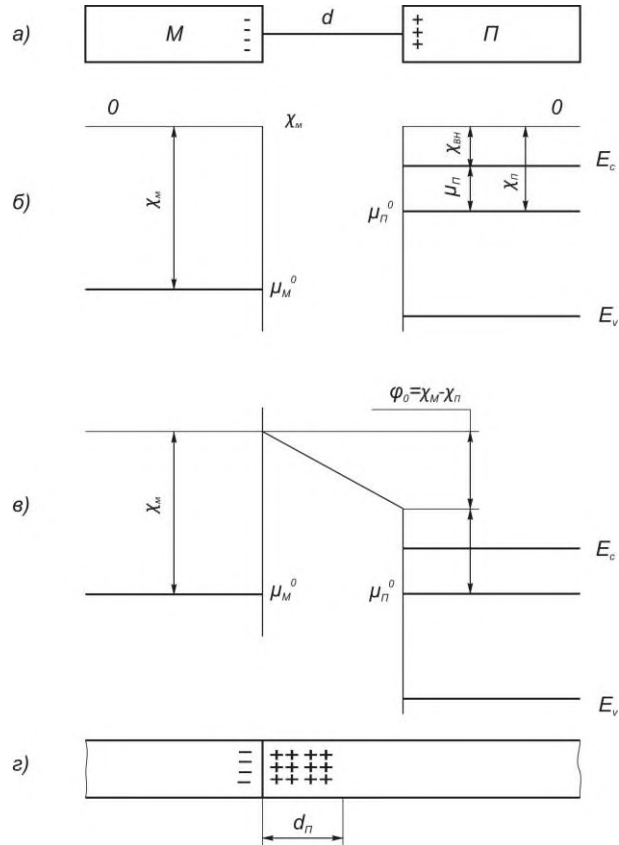


Рис. 28. Контакт полупроводника n -типа с металлом

При приложении прямого смещения к контакту металл – полупроводник n – типа, полупроводник заряжается относительно металла отрицательно, вследствие чего, все его уровни поднимаются на высоту eV относительно их положения в отсутствии V (Рис 28в).

Из рисунка д видно, что под действием внешней разности потенциалов V , приложенной в прямом направлении, потенциальный барьер понижается до величины:

$$\varphi(0) = \varphi_0 - eV$$

При приложении обратного напряжения все уровни полупроводника опустятся вниз на eV , и потенциальный барьер повышается до величины

$$\varphi(0) = \varphi_0 + eV$$

На основании вышеизложенного, можно сделать вывод. При приложении внешнего прямого напряжения ток растет пропорционально $e^{eV/kT}$ (распределение Больцмана). При приложении внешней разности потенциалов в запирающем направлении ток быстро достигает постоянного значения не зависящего от V . Таким образом, рассмотренный контакт обладает односторонней проводимостью, и уравнение статистической вольтамперной характеристики имеет вид:

$$I = I_s \cdot (e^{\pm eV/kT} - 1). \quad (3.65)$$

Р-п переход

Рассмотрим контакт двух полупроводников с различным типом проводимости (рис. 29а): слева от границы полупроводник р-типа (N_A), справа – полупроводник n-типа (N_D). Будем считать, что $N_D = N_A$ и равна, например, 10^{22} м^{-3} . На рис. 29б показано изменение концентрации доноров и акцепторов при перемещении вдоль оси x .

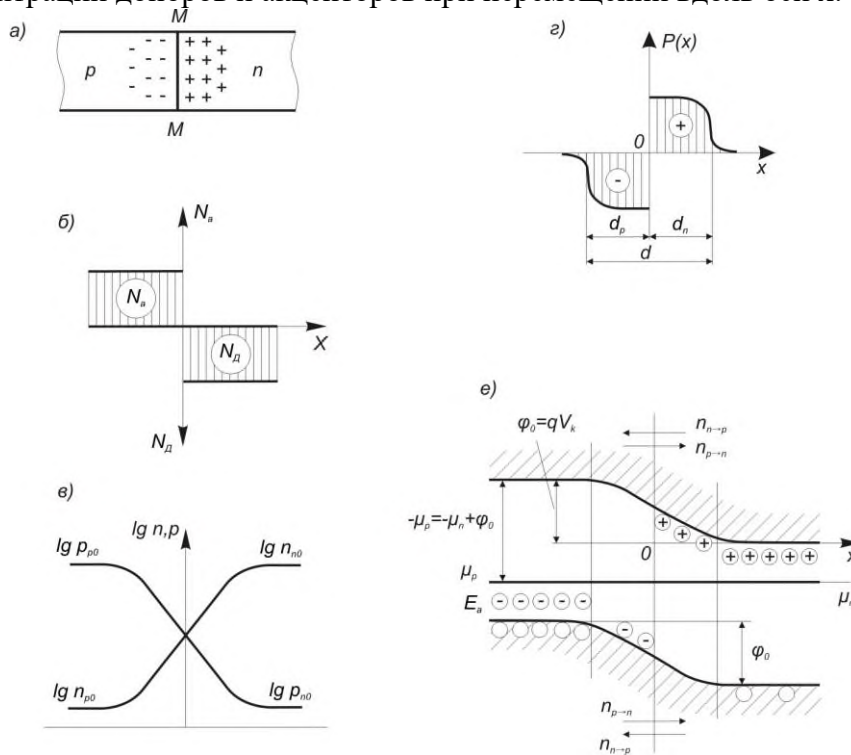


Рис. 29. Равновесное состояние $p - n$ -перехода

При неслишком низких температурах примесные атомы концентрируются практически полностью, вследствие чего равновесная концентрация электронов основных носителей в n – области $n_n \approx N_D$, а равновесная концентрация дырок основные носители в p – области $p_p \approx N_A$. При $n_n = p_p = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ и $n_i = 10^{19} \text{ м}^{-3}$ получаем: $n_p = p_n = 10^{16} \text{ м}^{-3}$.

Различие в концентрациях одностипных носителей в n и p – областях полупроводника приводит к диффузии дырок из p – области в n – область и электронов из n – области в p – область и зарядению этих областей. Зарядение происходит вследствие образования неподвижных объемных зарядов в слоях полупроводника толщиной d_n и d_p , расположенных по обе стороны от границы раздела: электроны, покинувшие n – область, оставляют в этой области нескомпенсированный положительный объемный заряд ионизированных доноров; дырки, ушедшие из p – области, оставляют в ней нескомпенсированный объемный отрицательный заряд ионизированных акцепторов.

На Рис. 30 показана зонная схема n - и p - областей полупроводника в момент приведения их в контакт. Зарядение n – области положительно вызывает понижение всех её уровней, а p – области – повышение.

Перетекание электронов справа налево и дырок слева направо происходит до тех пор, пока уровни химпотенциалов не устанавливается динамическое равновесие, которому соответствует равенство потоков основных и неосновных носителей

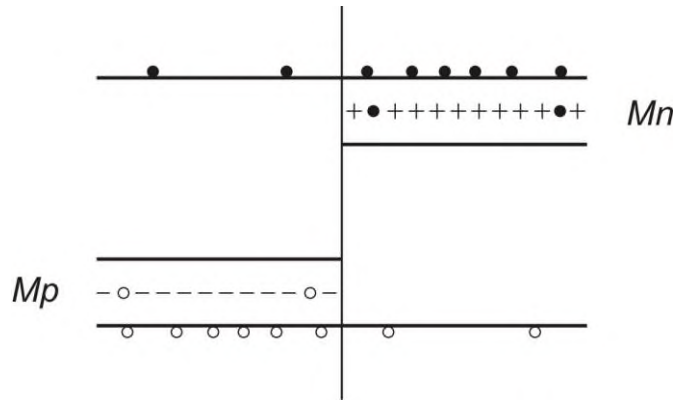


Рис. 30. Зонная схема n - и p - областей полупроводника в момент приведения их в контакт

Для n – области:

$$\begin{aligned} \dot{n}_{n \rightarrow p} &\approx n_n e^{eV_k/kT} \\ \dot{n}_{p \rightarrow n} &\approx n_p \end{aligned} \quad (3.66)$$

Для p – области:

$$\begin{aligned} \dot{p}_{p \rightarrow n} &\approx p_p e^{eV_k/kT} \\ \dot{p}_{n \rightarrow p} &\approx p_n \end{aligned} \quad (3.67)$$

Откуда контактная разность потенциалов:

$$V_k = \frac{kT}{e} \ln \frac{n_n p_p}{n_i^2} \quad (3.68)$$

Из формулы 3 видно, что потенциальный барьер возникающий в p - n переходе для основных носителей, тем выше, чем больше различие в концентрациях основных и неосновных носителей. В условиях равновесия результирующий ток через p - n переход равен нулю.

При наложении на p - n переход внешней разности потенциалов высота пот барьера для основных носителей уменьшается, что приводит к увеличению потока основных носителей в $e^{eV/kT}$ раз. В то же время величина тока неосновных носителей практически не зависит от приложенной разности потенциалов. Это вызывает нарушение равновесия между токами основных и неосновных носителей и появление результирующего тока в прямом направлении:

$$I = I_s (e^{eV/kT} - 1) \quad (3.69)$$

Приложение к p - n переходу обратного напряжения приводит к увеличению потенциального барьера, что способствует уменьшению потока основных носителей при этом не изменяется. Таким образом, при обратном смещении ($V < 0$) получаем выражение для тока:

$$I = I_s (e^{-eV/kT} - 1) \quad (3.70)$$

Объединим 4 и 5, получим:

$$I = I_s (e^{\pm eV/kT} - 1) \quad (3.71)$$

График вольтамперной характеристики приведен на рисунке 31:

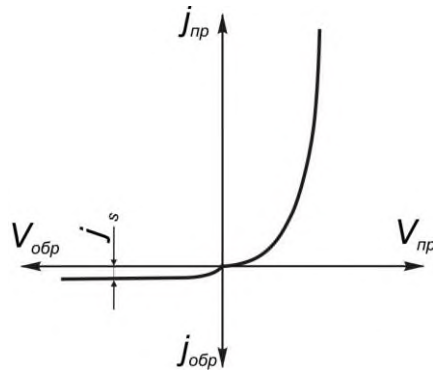


Рис. 31. ВАХ $p - n$ -перехода

Из рисунка видно, что при росте обратного смещения V обратный ток стремится к предельному значению I_s который называется током насыщения.

Задачи для самостоятельного решения.

1. Нарисовать энергетическую диаграмму и рассмотреть протекание тока через контакт металл-полупроводник p -типа с $\mu_m > \mu_p$.
2. К германиевому p - n переходу при $T=300\text{K}$ прикладывается внешнее смещение $V = \pm 0,025\text{В}$. Найти коэффициент выпрямления.
3. Вывести формулы и вычислить барьерную емкость и толщину p - n перехода, рассмотренного в задаче 1.
4. Имеется германиевый p - n переход с концентрацией примесей N_d .

3.6 Магнитные свойства твердых тел.

Намагниченность вещества по определению есть:

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_{mi}, \quad (3.72)$$

где N – число атомов в объеме V , $\vec{\mu}_{mi}$ – магнитный момент отдельного атома.

С другой стороны, в макроскопической электродинамике намагниченность:

$$\vec{M} = \chi \vec{H}, \quad (3.73)$$

где χ – магнитная восприимчивость, характеризующая способность тела намагничиваться, она показывает во сколько раз внутреннее магнитное поле больше, чем внешнее.

Удельная магнитная восприимчивость:

$$\chi_{y\delta} = \frac{\chi}{\rho}, \quad (3.74)$$

где ρ – плотность вещества.

Молярная магнитная восприимчивость:

$$\chi_m = \chi_{y\delta} \mu = \frac{\mu}{\rho} \chi, \quad (3.75)$$

где μ – молярная масса.

Полное поле в веществе, определяется так:

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \mu_0 \vec{M} \quad (3.76)$$

где \vec{B}_0 – внешнее поле в вакууме $\vec{B}_0 = \mu_0 \vec{H}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} (\text{Гн/м})$ – магнитная постоянная,

\vec{H} – напряженность магнитного поля.

Подставив в выражение (5) \vec{B}_0 и \vec{M} , получим выражение:

$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi)\vec{H} = \mu\mu_0\vec{H} \quad (3.77)$$

где $\mu=1+\chi$ – относительная магнитная проницаемость вещества.

Относительная магнитная проницаемость показывает во сколько раз индукция поля в веществе больше, чем в вакууме.

В зависимости от величины и знака χ все твердые тела делятся на 3 класса.

1. *Диамагнетики.* $\chi \approx -10^{-5}$, $\mu \leq 1$. К диамагнетикам относятся медь и диэлектрики.

2. *Парамагнетики.* $\chi \approx 10^{-4}$, $\mu \geq 1$. К парамагнетикам относятся вольфрам платина и др. Разница между первым и вторым классом в том, что в 1 случае внутреннее поле противоположно направлению внешнего, а во 2-ом они сонаправлены.

3. *Ферромагнетики.* $\chi \approx 10^2 \div 10^6$, $\mu \gg 1$. К ферромагнетикам относятся переходные и редкоземельные элементы периодической таблицы Менделеева.

Магнитные свойства твердых тел зависят от магнитных свойств атомов. С орбитальным движением электронов связан орбитальный магнитный момент:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m}\vec{L}, \quad (3.78)$$

где \vec{L} – полный орбитальный механический момент атома.

Значение орбитального магнитного момента определяется выражением:

$$\mu_L = -g_L \mu_b \sqrt{l(l+1)}, \quad (3.79)$$

где g_L – орбитальный же – фактор, равный 1; μ_b – магнетон Бора, l – орбитальное квантовое число.

Проекция этого момента на направление внешнего магнитного поля:

$$\mu_{Lz} = -g_L \mu_b m_L \quad (3.80)$$

где $m_L = \{-l \dots l\}$ – магнитное квантовое число.

Спиновый магнитный момент атома

Электрон, как известно обладает собственным механическим моментом – спином \vec{S} , с которым связан спиновый магнитный момент $\vec{\mu}_S$

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m}\vec{S} \quad (3.81)$$

где e – заряд электрона, m – его масса.

Величина спинового магнитного момента опирается на выражением (11):

$$\mu_S = -g_S \mu_b \sqrt{s(s+1)} \quad (3.82)$$

где s – полный спиновый момент, g_S – спиновый же – фактор, равный 2, μ_b – магнетон Бора.

Орбитальный механический и спиновый моменты дают полный механический момент.

$$\vec{L} + \vec{S} = \vec{J} \quad (3.83)$$

Результирующий магнитный момент атома в целом $\vec{\mu}_J$. В величина:

$$\mu_J = g \mu_S \sqrt{J(J+1)} \quad (3.84)$$

где J – суммарное квантовое число атома.

Коэффициент g называется множителем Ланде, он равен 1 для чисто орбитального магнетизма и 2 для чисто спинового магнетизма.

Примеры решения задач.

Задача 1. Какая сила F будет действовать на единицу объёма диамагнетика с $\chi = -8\pi \cdot 10^5$ помещённого в магнитное поле с $B = 0,1$ Тл, если градиент B : $\frac{dB}{dx} = 0,5 \frac{\text{Тл}}{\text{м}}$.

Решение

Всякая среда при внесении в неё во внешнее магнитное поле намагничивается в той или иной степени, то есть создаёт своё собственное магнитное поле накладываемое на внешнее. При внесении диамагнетика во внешнее магнитное поле атомы приобретают наведённые магнитные моменты, они пропорциональны B и противоположны по направлению, то есть диамагнетик намагничивается в направлении противоположном \vec{B} . Поэтому в неоднородном магнитном поле диамагнетик будет выталкиваться в область более слабого поля, следовательно выталкивающая сила определяется из выражения:

$$\vec{F} = -\text{grad } U \quad (1)$$

где U – потенциальная энергия взаимодействия диамагнетика с полем.

$$U = -\vec{M} \vec{B} \quad (2)$$

где \vec{M} – намагниченность

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \quad (3)$$

где \vec{H} – напряжённость внешнего магнитного поля.

$$B = \mu_0 (1 + \chi) H$$

Отсюда

$$H = \frac{B}{\mu_0 (1 + \chi)} \quad (4)$$

Подставляя (2),(3) в (4) получим:

$$U = -B\chi \frac{B}{\mu_0} = -\frac{B^2 \chi}{\mu_0}$$

Полученное выражение подставим в (1).

$$F = -\text{grad} \left(\frac{B^2 \chi}{\mu_0} \right) = \frac{d \left(\frac{B^2 \chi}{\mu_0} \right)}{d\chi} = 2B \frac{\chi}{\mu_0} \frac{dB}{d\chi}$$

Подставим числовые значения:

$$F = 2 \cdot 0,1 \cdot \frac{-8\pi \cdot 10^5}{4\pi \cdot 10^{-7}} \cdot 0,5 = -20 \text{ Н}$$

Ответ: $F = -20$ Н.

Задачи для самостоятельного решения.

- 9.1 Построить квантовую теорию парамагнетизма для системы спинов $S = \frac{1}{2}$, считая, что их в единице объёма n . Воспользоваться статистикой Максвелла – Больцмана. Получить выражение для намагниченности \mathbf{M} .
- 9.2 Определить намагниченность \mathbf{M} тела при насыщении, если магнитный момент каждого атома равен магнетону Бора μ_B и концентрация атомов $6 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$.
- 9.3 Магнитная восприимчивость χ марганца равна $1,21 \cdot 10^{-4}$. Вычислить намагниченность \mathbf{M} , удельную намагниченность и молярную намагниченность марганца в магнитном поле напряжённостью $H=100 \text{ кА/м}$. Плотность марганца считать известной.
- 9.4 Найти магнитную восприимчивость $AgBr$, если его молярная магнитная восприимчивость $\chi_m = 11,30 \cdot 10^{-9} \text{ м}^3/\text{кг}$.
- 9.5 Атом водорода находится в магнитном поле с индукцией $B=1 \text{ Тл}$. Вычислить магнитный момент μ_m , обусловленный прецессией электронной орбиты. Принять, что среднее значение квадрата расстояния электрона от ядра равно $2r_1^2/3$ (r_1 – радиус первой боровской орбиты).
- 9.6 Удельная парамагнитная восприимчивость $\chi_{уд}$ трехоксида ванадия (V_2O_3) при $t = 17^\circ\text{C}$ равна $1,89 \cdot 10^{-7} \text{ м}^3/\text{кг}$. Определить магнитный момент μ_m (в магнетонах Бора), приходящейся на молекулу V_2O_3 , если плотность трехоксида ванадия равна $4,87 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.
- 9.7 Определить, при каком наибольшем значении магнитной индукции B уже следует пользоваться не приближенным выражением функции Ланжевена $L(a) \approx a/3$, а точным, чтобы погрешность вычислений не превышала 1%. Для расчетов принять магнитный момент молекул равным магнетону Бора. Температура $T=300 \text{ К}$.
- 9.8 Определить, во сколько раз число молекул, имеющие положительные проекции магнитного момента на направление вектора магнитной индукции внешнего поля ($B = 1 \text{ Тл}$), больше числа молекул, имеющих отрицательную проекцию, в двух случаях: 1) $T_1=300 \text{ К}$; 2) $T_2=1 \text{ К}$. Магнитный момент молекул принять равным магнетону Бора.
- 9.9 При температуре $T_1=300 \text{ К}$ и магнитной индукции $B_1=0,5 \text{ Тл}$ была достигнута определенная намагниченность J парамагнетика. Определить магнитную индукцию B_2 , при которой сохранится та же намагниченность, если температуру повысить до $T_2=450 \text{ К}$.

3.7 Сильномагнитные свойства твёрдых тел

Сильномагнитными свойствами обладают ферромагнетики. Ферромагнетизм обусловлен спиновыми магнитными моментами атомов. Поэтому именно спиновые магнитные моменты электронов, не скомпенсированные в атомах, и являются элементарными носителями ферромагнетизма. Так как магнитные моменты заполненных оболочек равны нулю, а внешние валентные электроны обобществляются в металле, то ферромагнетизмом могут обладать лишь переходные элементы, характеризующиеся наличием недостроенных внутренних оболочек.

Энергия обменного взаимодействия определяется соотношением:

$$U_{ex} = -I(\vec{S}_i, \vec{S}_j), \quad (3.85)$$

где I – обменный интеграл, \vec{S}_i и \vec{S}_j – результирующие спиновые моменты взаимодействующих атомов. I может быть как положительным, так и отрицательным.

Знак обменного интеграла определяем, какая ориентация спинов у электронов, участвующих в образованной связи, является выгодной – параллельная или антипараллельная. При положительном знаке интеграла ($I > 0$) обменная энергия будет отрицательной и энергия системы в целом будет уменьшаться в том случае, если спиновые моменты атомов \vec{S}_i и \vec{S}_j будут параллельны друг другу: $\vec{S}_i \downarrow\downarrow \vec{S}_j$.

При отрицательном знаке обменного интеграла энергетическим становится антипараллельное расположение спинов у соседних атомов решётки.

Таким образом, наличие в атоме внутренних нестроенных электронных оболочек и положительный знак обменного интеграла, обуславливающий параллельную ориентацию спинов, является тем условием, при котором возникает ферромагнетизм.

Если $S_i = S_j = S$ и образуют друг с другом угол θ , то выражение 1 можно переписать так:

$$U_{ex} = -IS^2 \cos \theta \quad (3.86)$$

Намагниченность ферромагнетика согласно закону Вейса определяется выражением:

$$M = n\mu_m L \left[\frac{\mu_0 \mu_m (H + \lambda M)}{kT} \right], \quad (3.87)$$

где $\mu_m = g_S \mu_B B$ – магнитный момент, λ – константа магнитного поля $\left(\lambda = \frac{IZV_0}{\mu_0 g_S^2 \mu_B^2} \right)$, V_0 – объём приходящийся на 1 спин.

Примеры решения задач.

Задача 1. Вычислить энергию магнитного взаимодействия 2^X диполей, каждый из которых имеет $\mu_m = \mu_b$ и найти область температур, где возможно магнитное дипольное упорядочение. Диполи расположены параллельно друг другу и линии, соединяющей их центры. Расстояние диполями 2Å .

Решение

Допустим, диполи расположены как показано на рисунки. Причём один из диполей магнитное поле создаёт, а другой в нём находится.

Энергия диполь - дипольного взаимодействия:

$$U_{dd} = -\vec{\mu}_2 \vec{B}_1 \quad (1)$$

где μ_2 – магнитный момент второго диполя, B_1 – магнитное поле созданное 1-ым диполем на расстоянии r .

$$\vec{B}_1 = \mu_0 \left(\frac{\vec{\mu}_1}{r^3} - \frac{r \cdot 3(\vec{\mu}_1, r)}{r^5} \right) \quad (2)$$

Подставляя 2 в 1, получим:

$$U_{dd} = \mu_0 \left(\frac{\vec{\mu}_1 \vec{\mu}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{\mu}_1 \vec{r})(\vec{\mu}_2 \vec{r})}{r^5} \right) = \mu_0 \left(\frac{\mu_b^2}{r^3} - \frac{3(\mu_b r)^2}{r^5} \right) = -\frac{2\mu_0 \mu_b^2}{r^3}$$

Подстановка числовых значений даёт следующее выражение:

$$U_{dd} = \frac{-2 \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 9,27 \cdot 10^{-48}}{8 \cdot 10^{-30}} \approx -2,5 \cdot 10^{-23} \text{ Дж.}$$

Докажем, что это выстраивание не может привести к упорядочиванию. “Выстраивание” диполей происходит тогда, когда тепловая энергия меньше чем энергия диполь - дипольного взаимодействия.

$$|U_{dd}| > kT$$

Отсюда:

$$T_d < \frac{U_{dd}}{k} = \frac{2,5 \cdot 10^{-23}}{1,38 \cdot 10^{-23}} \approx 2\text{К}$$

Это означает, что магнитное упорядочивание возможно только при температуре 2К.

Ответ: $T_d \approx 2\text{К}$

Задачи для самостоятельного решения.

- 10.1 На основе модели молекулярного поля построить полуклассическую теорию ферромагнетизма, используя формулу Ланжевена. Показать что при температуре $T < \theta_c$ устойчивым является состояние со спонтанной намагниченностью.
- 10.2 Построить полуклассическую теорию антиферромагнетизма.
- 10.3 Кусок стали внесли в магнитное поле напряженностью $H=1600$ А/м. Определить намагниченность M стали.
- 10.4 Прямоугольный ферромагнитный брусок объемом $V = 10 \text{ см}^3$ приобрел в магнитном поле напряженностью 800 А/м магнитный момент $p_m = 0,8 \text{ МА/м}^2$. Определить магнитную проницаемость μ ферромагнетизма.
- 10.5 Вычислить среднее число магнетонов Бора, приходящихся на один атом железа, если при насыщении намагниченность железа равна 1,84 МА/м.
- 10.6 На один атом железа в незаполненной 3d-оболочке приходится четыре неспаренных электрона. Определить теоретическое значение намагниченности железа при насыщении.
- 10.7 В нейтральном атоме железа два электрона находятся в 4s-состоянии при не полностью заполненной внутренней 3d-оболочке. Учитывая, что при ионизации сначала удаляются 4s-электроны, приведите распределение электронов по энергетическим состояниям в свободном атоме железа, а также в двух- и трехвалентных ионах железа.
- 10.8 При насыщении магнитная индукция чистого железа $B=2,2$ Тл. Учитывая, что элементарная ячейка кристаллической решетки железа представляет собой объемно-центрированный куб с ребром $a=0,286$ нм, рассчитать магнитный момент, приходящийся на один атом железа (в магнетонах Бора).
- 10.9 Магнитная индукция насыщения металлического никеля, имеющего плотность 8960 кг/см^3 , равна 0,65 Тл. Определить магнитный момент, приходящийся на один атом никеля (в магнетонах Бора).

3.8 Сверхпроводимость

Основные экспериментальные факты

В 1911г. была открыта сверхпроводимость. При достаточно низкой T сопротивление проводника падало до 0: $\rho \rightarrow 0$ и $\sigma \rightarrow \infty$ (рис.32), то есть проводник становился идеальным. T_c – критическая температура, соответствующая переходу из состояния с нормальным сопротивлением в сверхпроводящее состояние.

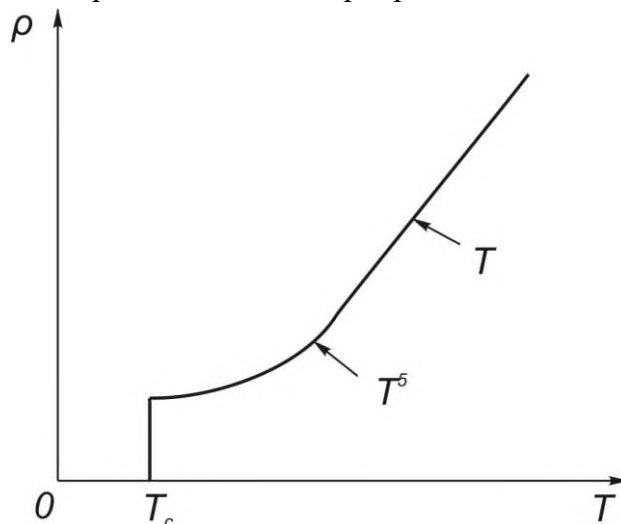


Рис.32. Зависимость сопротивления от температуры

Идеальный диамагнетизм – эффект Мейснера (рис. 33).

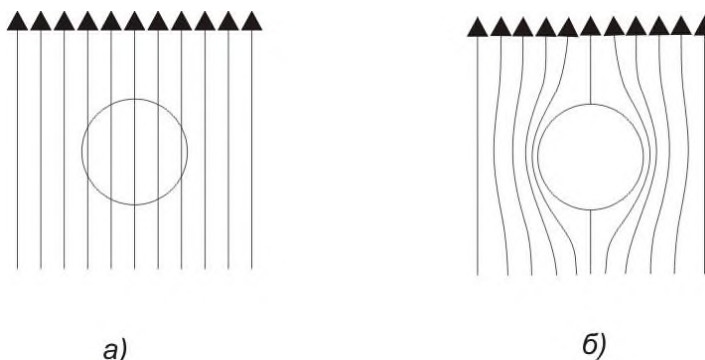


Рис. 33. Эффект Мейснера-Оксенфельда (выталкивание магнитного поля из проводника при переходе в сверхпроводящее состояние)

Поместим шар из сверхпроводящего материала в постоянное магнитное поле. Силовые линии пронизывают образец при $T > T_c$. Если охладить образец ниже T_c , то силовые линии магнитного поля выталкиваются разом из образца $B=0$

$$\vec{B} = \mu\mu_0 \vec{H},$$

где \vec{H} - напряженность магнитного поля, μ - магнитная проницаемость среды ($\mu=1+\chi$).

При $H=H_c$ (критическое) магнитное поле разом пронизывает тело и сверхпроводящее состояние разрушается (рис. 34).

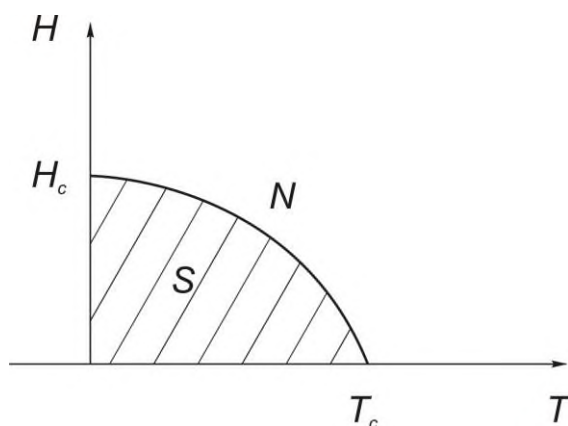


Рис.34 Температурная зависимость критического магнитного поля

Как известно, теплоемкость металла складывается из теплоемкости кристаллической решетки и электронной теплоемкости. При очень низких температурах в нормальном состоянии образца основной вклад в его теплоемкость вносит электронная подсистема. В сверхпроводящем состоянии соотношение между теплоемкостью кристаллической решетки и электронной теплоемкостью существенно меняется, поскольку теперь электронная теплоемкость убывает не по степенному, а по экспоненциальному закону. Если говорить только об электронной теплоемкости металла, то при переходе точки T_c наблюдается скачок электронной теплоемкости.

Центральным пунктом теории сверхпроводимости является наличие (при $T < T_c$) энергетической щели в спектре возбуждений сверхпроводника. В таком спектре нет состояний, отстоящих от основного на сколь угодно малую величину, как это имеет место в нормальном состоянии металла. В известном смысле это напоминает полупроводник с запрещенной зоной шириной Δ , определяющей энергию связи куперовской пары. Происходит поглощение электромагнитного излучения на частотах, больших 10^{11} Гц, что говорит о том, что энергетическая щель должна быть порядка 10^{-4} эВ (это соответствует температуре около 1 К).

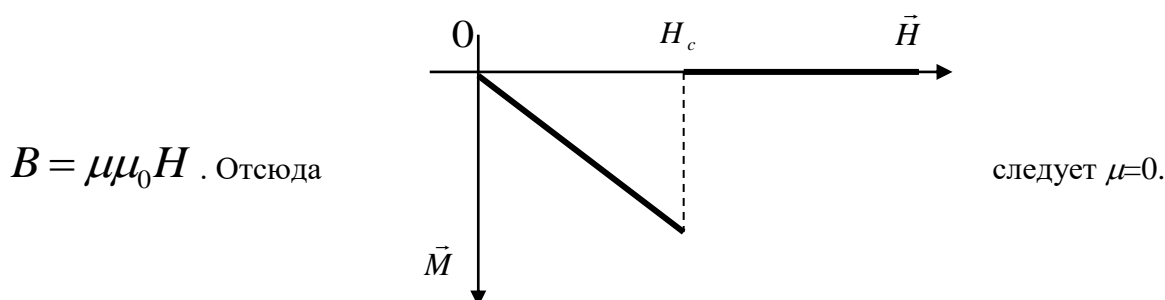
Примеры решения задач.

Задача 1. Пользуясь экспериментальным фактом выталкивания магнитного поля $H < H_c$ из толщи сверхпроводника, найти магнитную проницаемость, восприимчивость и намагниченность сверхпроводника. Изобразить графически зависимость

$$\vec{M}(\vec{H}) \text{ для сверхпроводника 1-го рода. Рассмотреть } H < H_c.$$

Решение

В сверхпроводниках $B=0$.



$$\mu = 1 + \chi = 0 \Rightarrow \chi = -1.$$

Следовательно $M_D = \chi_D H = -H$.

Ответ: $M_D = -H$.

Задача 2. Критическая температура сверхпроводящего перехода олова при $H=0$, $T_{co}=3,7$ К, а критическое поле при $T=0$; $H_{co}=2,4 \cdot 10^4$ А/м. Найти величину критического тока, протекающего в оловянной проволоке диаметром 0,1м при 2К.

Решение

При протекании тока по сверхпроводнику вокруг него возникает магнитное поле напряженностью \vec{H} . Пока ток не достиг критического значения сверхпроводящее состояние осуществляется, при достижении током критического значения напряженность магнитного поля $H > H_c$ и сверхпроводящее состояние разрушается. Зависимость H_c от T имеет вид:

$$H_c = H_{co} \left[1 - \left(\frac{T}{T_{co}} \right)^2 \right]$$

И определим из формулы для напряженности магнитного поля кругового тока в центре.

$$H_c = \frac{I_c}{2\pi r} = \frac{I_c}{\pi d},$$

где I_c – критическая сила тока, d – диаметр проволоки.

$$I_c = H_c \pi d = H_{co} \pi d \left[1 - \left(\frac{T}{T_{co}} \right)^2 \right].$$

Расчет дает значение $I_c = 5,4 \cdot 10^3$ А.

Задачи для самостоятельного решения.

- 10.10 Пользуясь уравнением Лондонов решить задачу о проникновении магнитного поля в пластинку толщиной $2d$ (полубесконечный сверхпроводник). Найти величину магнитной индукции в центре пластины, если индукция внешнего поля $B_0 = 0,05$ Тл, глубина проникновения $\lambda = 100$ Å, а толщина пластинки $2d = 200$ Å.