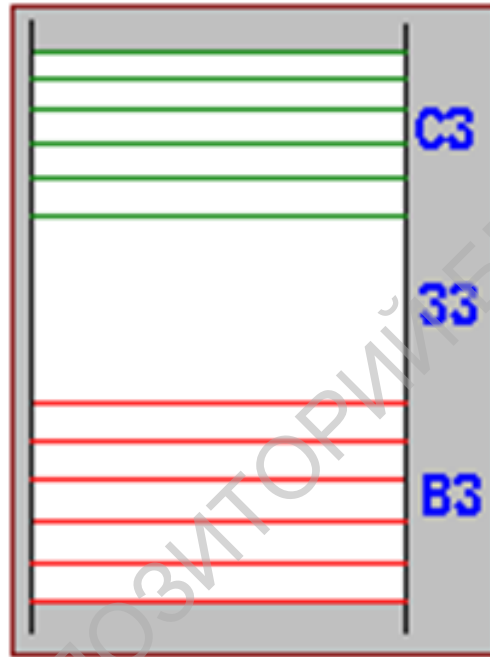


ТЕМА 5. Квантовые явления в твердых телах.

§ 1 Энергетические зоны в кристаллах.

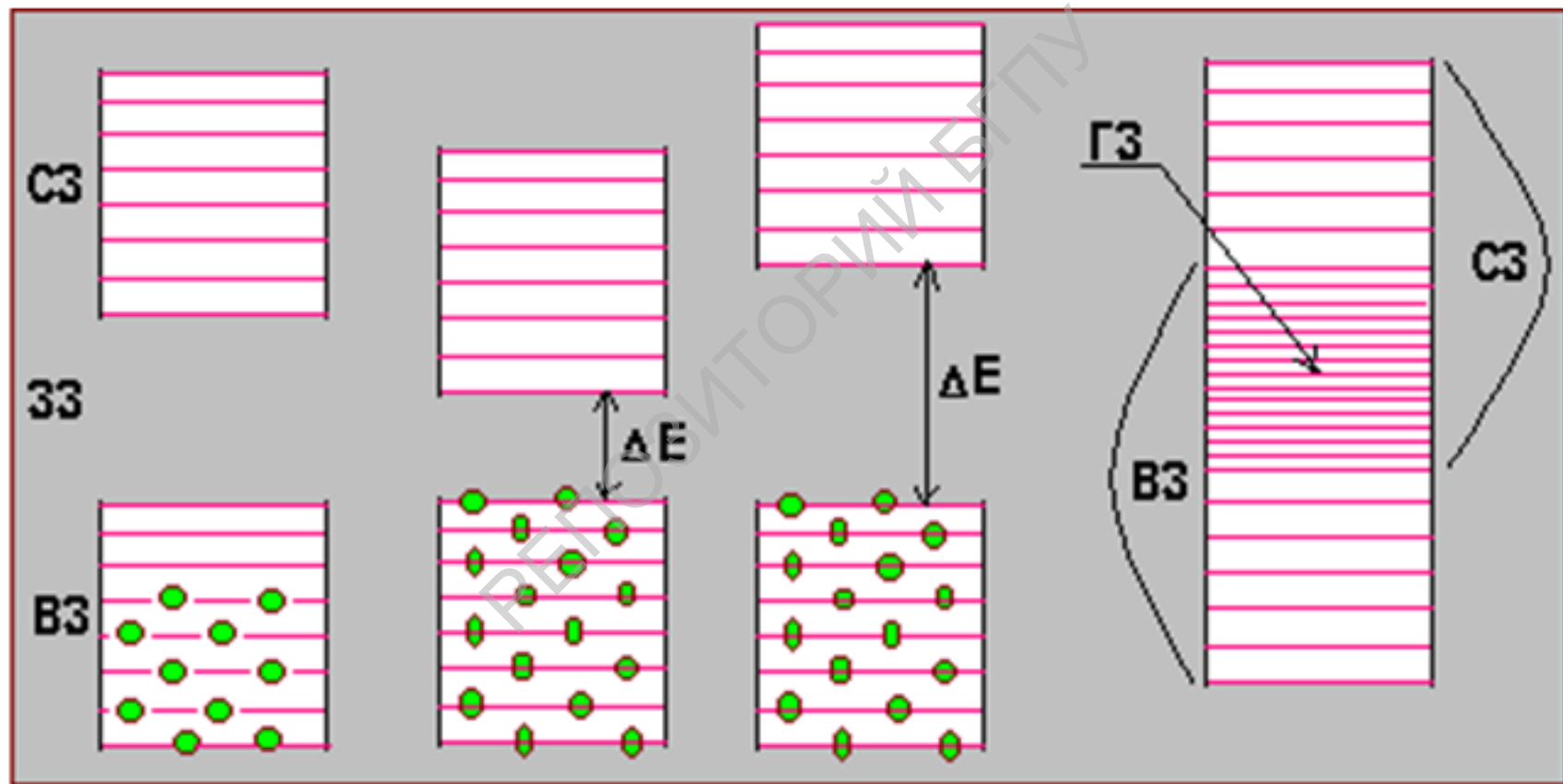


$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi ,$$



Блох доказаў, што $\psi_k \cong U_k(r)e^{ikr}$, дзе $U_k(r)$ – функцыя, якая вызначае перыядычнасьць рашоткі; ψ_k – функцыя Блоха.

§ 2 Металы, паўправаднікі, дыэлектрикі.



§ 3 Паняцце аб квантавых статыстыках.

$$f(E) = Ce^{-E_i/kT}$$

У квантавай фізіцы разлічаюць *дзе статыстыкі*:

- 1) Базэ-Эйнштэйна
- 2) Фермі-Дзірака

1) Статыстыка Базэ-Эйнштэйна.

Асноўныя палажэнні:

- а) часціцы з'яўляюцца тоеснымі;
- б) энергія носіць дыскрэтны характар;
- в) спін часціц цэлы або нулявы;
- г) часціцы не падпарадкоўваюцца прынцыпу Паўлі, т.е. у кожным квантавым стане можа знаходзіцца любы лік часціц (мікрасціц).

Функцыя размеркавання Базэ-Эйнштэйна мае выгляд:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} - 1}$$

$$f(E_i); \langle n_i \rangle; E_i,$$

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/kT} - 1}$$

дзе E_i – энергія часціцы ў стане i ; μ – хімічны патэнцыял, які апрадзяляецца з умовы $\sum \langle n_i \rangle = N$, дзе N – поўны лік часціц у сістэме.

Значэнні μ не могуць быць больш 0, так як пры $E_i < \mu \Rightarrow \langle n_i \rangle < 0$ (адмоўна), што не мае фізічнага сэнсу.

Т.ч. $\mu \leq 0$.

Часціцы, якія падпарадкоўваюцца размеркаванню Барэ-Эйнштэйна называюцца базонамі. Базоны не падпарадкоўваюцца прынцыпу Паўлі і імавернасць P нараджэння базона ў стане, у якім ужо ёсць n часціц прапарцыянальна n . $P \sim n$.

Такім чынам, базоны “любяць” накаплівацца ў адным стане – яны з’яўляюцца “калектывістамі”.

Да базонаў адносяцца: фатоны, фаноны, мезоны.

2) Статыстыка Фермі-Дзірака.

Палажэнні:

- а) часціцы тоесныя;
- б) энергія носіць дыскрэтны характар;
- в) спін часціц паўцэлы;
- г) часціцы падпарадкоўваюцца прынцыпу Паулі.

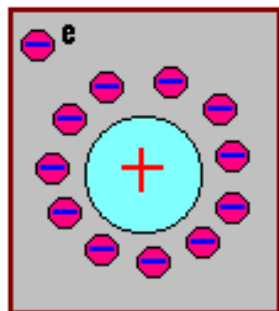
Функцыя мае выгляд:

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

Параметр μ мае даданыя значэнні, гэта не прыводзіць да адмоўнага значэння лікаў $\langle n_i \rangle$. Часціцы, якія падпарадкоўваюцца гэтай статыстыцы называюцца ферміонамі (электронны, нуклоны, пазітроны).

Як бачым, хімічны патэнцыял μ выражае нейкую энергію.

§ 4 Узровень і энергія Фермі.



А рух свабоднага электрона апісваецца раўнаннем Шродзінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi ;$$

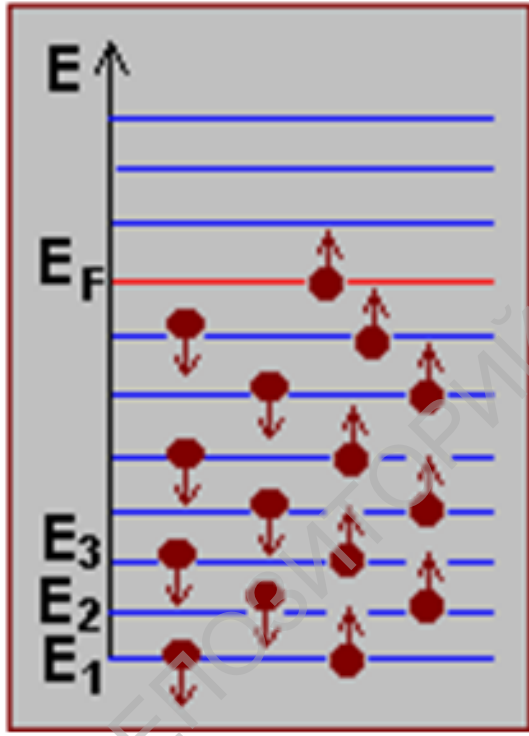
Стан свабоднага электрона вызначаецца вектарам \vec{k} - хвалёвы вектар або імпульсам:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} ; \text{ з энергіяй } E = \frac{P^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} .$$

У квантавай механіцы паказваецца, што значэнні хвалёвага вектара квантуюцца, значыць квантуецца і энергія электронаў праводнасці. Размеркаванне электронаў па энергетычных узроўнях апісваецца статыстыкай Фермі-Дзірака.

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

Система свободных электронаў называецца электронным газам ці ідэальным газам Фермі.



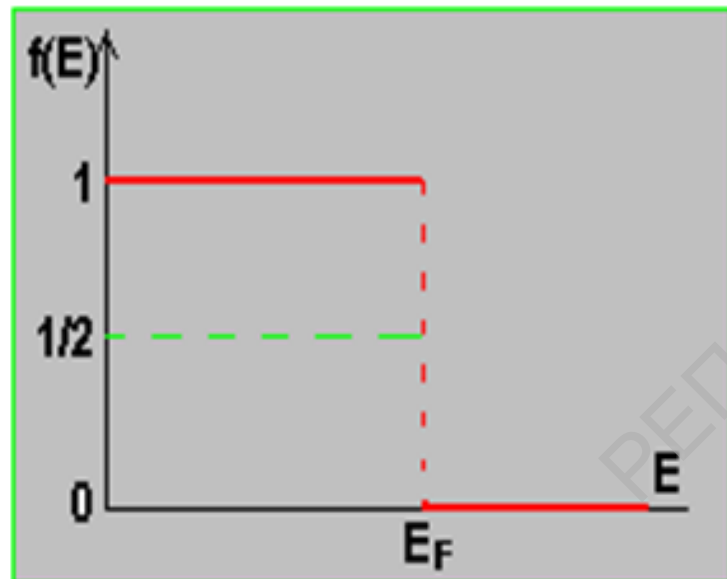
$E_{F(0)}; n$

$$E_{F(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

Калі $n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$, то пры $T=300 \text{ К}$ (пакаёвая):

$$E_F \sim 5 \text{ эВ}$$

Калі разгледзіць размеркаванне Фермі-Дзірака, то можна пабудаваць залежнасць $f(E)$ ад E . $T=0$.



1) $E < E_F$, $f(E) = 1$

2) $E > E_F$, $f(E) = 0$

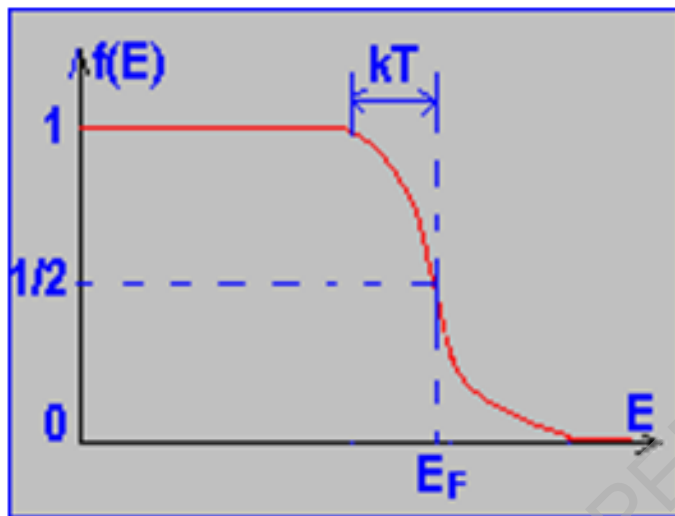
3) $E = E_F$, $f(E) = 1/2$

§ 5 Цеплаёмістасць электроннага газу.

У фізіцы існуюць *дзве тэорыі электроннага газу:*

- *класічная тэорыя Друдэ;*
- *квантавая тэорыя Зомерфельда.*

Чым жа адрозніваецца квантавы электронны газ ад класічнага?



Пры $T=0$, ступенка Фермі ў вобласці $E=E_F$ мае разрыў. Пры павышэнні тэмпературы ступенька Фермі размываецца на велічыню $\sim kT$ (k - пастаянная Больцмана). Пры гэтым частка электронаў валентнай зоны перайдуць на ўзроўні, якія ляжаць паблізу ўзроўня Фермі, але вышэй яго. Чым больш тэмпература, тым больш размыццё.

$$T_K = \frac{E_F}{k}$$

- крышталічная тэмпература ці тэмпература Фермі, ці

тэмпература выраджэння.

Пры $T < T_K$ – газ выраджалны (квантавы), $T > T_K$ – газ невыраджалны (класічны).

Доля электронаў, якія знаходзяцца ў валентнай зоне і ўздзейнічаюць у цеплавым руху (размываюць ступеньку Фермі) $N \sim \frac{kT}{E_F}$, а калі іх агульная

колькасць у валентнай зоне N_0 , то $N = N_0 \frac{kT}{E_F}$, з улікам $E_F = kT_0$ атрымаем,

што:
$$N = N_0 \frac{kT}{kT_k} = N_0 \frac{T}{T_k}.$$

Кожны электрон атрымлівае энергію $\sim kT$.

Такім чынам, унутраная энергія электроннага газу (электронаў, якія удзельнічаюць у цеплавым руху) будзе роўная:

$$U = NkT \text{ ці}$$

$$U = N_0 \frac{T}{T_k} kT = N_0 \frac{kT^2}{T_k}.$$

Калі ўзяць 1 моль рэчыва, то $N_0 = N_A$.

Такім чынам, $U = N_A k T^2 / T_k = R \frac{T^2}{T_k}$, пры $V = \text{const}$

$C_{\mu_e} = \frac{dU}{dT}$ - малярная цеплаёмкасць электроннага газу.

$$C_{\mu_e} = \frac{d}{dT} \left(R \frac{T^2}{T_k} \right) = \frac{2RT}{T_k} = \beta T, \quad \text{дзе } \beta = \frac{2R}{T_k}.$$

Такім чынам, свабодныя электроны, якія знаходзяцца ў валентнай зоне паблізу ўзроўню Фермі і ўтвараюць квантавы электронны газ, валодаюць

малярнай цеплаёмкасцю $C_{\mu_e} = \beta T$, якая змяняецца $\sim T$.

$$C_{\mu_e}^{\text{class}} = (3/2)R.$$

Цеплаёмкасць квантавага газу ў T/T_k разоў меншая чым цеплаёмкасць класічнага газу.

§ 6 Квантавая тэорыя цеплаёмістасці.

Тэорыя Эйнштэйна.

Асноўныя палажэнні:

- 1) атомы Эйнштэйна разглядаў як незалежныя гарманічныя асцылятары з трыма ступенямі свабоды i , калі гэтых атамаў N , то асцылятараў $3N$;
- 2) усе асцылятары вагаюцца з адной частатой ω - const.
- 3) $E_0 \neq (1/2)\hbar\omega$ - нулявая энергія ваганняў не ўлічвалася.

Згодна Эйнштэйна сярэдняя энергія аднамернага гарманічнага асцылятара пры тэмпературы T :

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

Тады ўся ўнутраная энергія $U = 3N\bar{\varepsilon}$, а ў выпадку аднаго моля $N=N_A$ і ўся энергія моля будзе:

$$U_{\mu} = 3N_A \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad \text{пры } V - \text{const.}$$

Малярная цеплаёмістасць крышталічнай рашоткі:

$$C_{\mu} = \frac{dU_{\mu}}{dT} = \frac{d}{dT} \left(3N_A \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \right) = 3N_A \left(\frac{-\hbar\omega}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)^2} \right) \cdot \ell^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \left(-\frac{\hbar\omega}{kT^2} \right)$$

памножым і падзелім на k

$$C_{\mu} = 3N_A k \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)^2},$$

дзе $\frac{\hbar\omega}{k} = Q_E$ - характарыстычная тэмпература Эйнштэйна.

Гэта тэмпература, якая вызначае граніцу паміж квантавым і класічным газам.

$$\text{Т.ч. } C_{\mu} = 3R \left(\frac{Q_E}{T} \right)^2 \frac{e^{Q_E/T}}{(e^{Q_E/T} - 1)^2}$$

$$1) T \gg Q_E; \quad e^{Q_E/T} \approx 1 + \frac{Q_E}{T} + \dots \quad e^{Q_E/T} \approx 1$$

$C_{\mu} = 3R$ – закон Дзюлонга і Пі.

[1. кол. сцел. сваб. kT ; ч. цел. сваб. $3N$ для моля $\varepsilon = 3N_A kT$; $V - \text{const}$;

$$C_{\mu} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} = 3N_A k = 3R \quad \text{к-постоянная Больцмана, } R\text{-универсальная газовая}$$

постоянная].

2) $T \ll Q_E$ “1” у знаменат. не ўлічваем $e^{Q_E/T} \gg 1$.

$$C_{\mu} = 3R \left(\frac{Q_E}{T} \right)^2 e^{-Q_E/T} \quad \text{- выраз пры нізкіх тэмпературах.}$$

Множнік $e^{Q_E/T}$ павялічваецца хутчэй, чым T^2 , гэта значыць, што ў вобласці $T \rightarrow 0$ цеплаёмістасць рашоткі змяняецца па exp. закону, а дослед паказвае, што па закону T^3 . Т.ч тэорыя Эйнштэйна пры нізкіх тэмпературах мае недахопы.

Тэорыя Дэбая.

Асноўныя палажэнні:

- 1) Атамы разглядаюцца як гарманічныя, але ўзаемадзеячыя асцылятары. Калі атамаў N , то асцылятараў $3N$.
- 2) Атамы цвёрдага цела робяць ваганні з рознымі частотамі ад 0 да ω_{\max} , $\omega_{\max} \neq \infty$.
- 3) Улічваецца энергія нулявых ваганняў (пры $T=0$) $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$.

У выніку разлікаў атрыманы выраз:

$$C_{\mu} = 9R \left(\frac{T}{Q_D} \right)^3 \int_0^{x_{\max}} \frac{e^x x^4}{(e^x - 1)^2} dx, \quad (*)$$

дзе $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$, а Q_D – характэрная тэмпература Дэбая.

$$Q_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k}$$

Тэмпература Дэбая паказвае тую тэмпературную мяжу, ніжэй якой становіцца істотным квантаванне энергіі ваганняў атамаў цвёрдага цела.

Формула (*) атрымана з улікам нулявых ваганняў. Калі энергію нулявых ваганняў не ўлічваць, то выраз для малярнай цеплаёмкасці пры $V = \text{const}$ мае выгляд:

$$C_{\mu} = 3R \left[12 \left(\frac{T}{Q_D} \right)^3 \int_0^{Q_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx - \frac{3 \frac{Q_D}{T}}{e^{Q_D/T} - 1} \right]$$

Разглядзім прэдельныя выпадкі:

1. $T \gg Q_D$, то $e^{Q_D/T} \approx 1 + Q_D/T$; $e^x \approx 1 + x$

$$C_\mu = 3R \left[12 \left(\frac{T}{Q_D} \right)^3 \int_0^{Q_D/T} x^2 dx - 3 \right] = 3R \left[12 \left(\frac{T}{Q_D} \right)^3 \cdot \frac{1}{3} \cdot \left(\frac{Q_D}{T} \right)^3 - 3 \right] = 3R$$

закон Дзюлонга і Пці.

2. $T \ll Q_D$; $\frac{3Q_D}{T} \rightarrow 0$; $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$.

Т.ч. $C_\mu = 3R 12 \left(\frac{T}{Q_D} \right)^3 \frac{\pi^4}{15} = \frac{12\pi^4 R}{5Q_D^3} T^3 = \alpha T^3$ - закон кубаў Дэбая.

Трэба мець на ўвазе, што тэорыя Дэбая добра адпавядае эксперыменту толькі для цел з простымі крышталічнымі рашоткамі, для складаных хімічных злучэнняў гэтая тэорыя не выкарыстоўваецца.

§ 7 Цеплаёмістасць металаў.

Метал як крышталічная структура складаецца з крышталічнай рашоткі і электроннага газу, таму поўная цеплаёмістасць метала раўна $C = C_{\mu} + C_{\mu e}$ – малярная цеплаёмістасць металаў.

Пры $T \gg Q_D$ маем выпадак невыраджанага электроннага газу, і пры выконванні закона Дзюлонга і Пці:

$$C^{klas} = 3R + \frac{3}{2}R = \frac{9}{2}R \qquad C^{klas} \neq C(T)$$

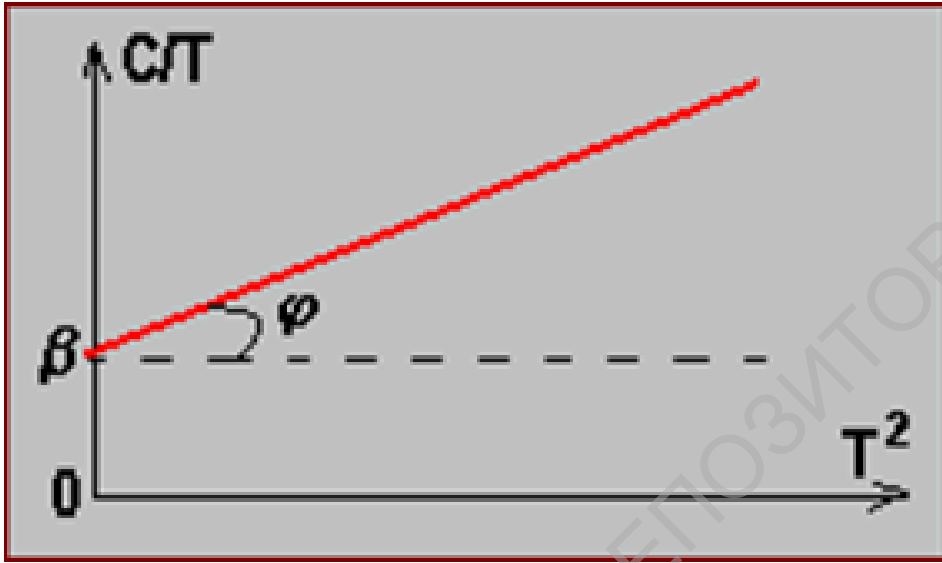
решетка газ

Пры $T \ll Q_D$ маем квантавы выпадак:

$$C^{kv} = \alpha T^3 + \beta T \qquad C^{kv} = C(T)$$

решетка газ

Падзелім роўнасць на T : $\frac{C^{kv}}{T} = \alpha T^2 + \beta$, пабудуем графік $\frac{C}{T}(T^2)$



$$\frac{C}{T} = f(T^2); \alpha = \operatorname{tg} \varphi$$

§ 8 Фаноны. Цеплаправоднасць дыэлектрчных крышталёў.

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_k \hbar \omega_k \text{ пры ўсіх } \underline{n_k=0}; \underline{n_k} - \text{узроўні энергіі.}$$

Пры $T=0$ энергія цеплавога руху атамаў крышталічнай рашоткі вызначаецца:

$$E = \sum_k \hbar \omega_k$$

Атам рашоткі падобны да гарманічнага асцылятара, які выконвае нармальныя ваганні з частатой ω_k . Пры змяненні $\underline{n_k}$ на адзінку ўнутраная энергія крышталю змяняецца на $\hbar \omega_k$.

У квантавай фізіцы гэту порцыю (квант) энергіі нармальнага вагання назвалі фаноном, які валодае энергіяй і квазіімпульсам (пры ўзаемадзействіі двух фононаў іх імпульс можа порцыямі перадавацца крышталічнай рашотцы, а значыць не захоўваецца).

$$\varepsilon = \hbar \omega; \quad \vec{P} = \hbar \vec{k},$$

дзе $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ - хвалевы вектар.

$$P = \hbar k = \left| \begin{array}{l} k = \frac{2\pi}{\lambda} \\ \lambda = \frac{v}{\nu} \end{array} \right| = \frac{\hbar 2\pi \nu}{v} = \frac{\hbar \omega}{v},$$

дзе v – хуткасць фатона, якая супадае з хуткасцю гука, які распаўсюджваецца ў гэтым асяроддзі.

Фаноны маюць цэлы спін ($S=1$) і падпарадкоўваюцца статыстыцы Базэ-Эйнштэйна.

Фаноны з'яўляюцца базонамі.

$$Q = -\kappa \frac{\Delta T}{\Delta X} \Delta S \Delta t,$$

дзе $\frac{\Delta T}{\Delta X}$ - градыент тэмпературы; ΔS - плошча пляцоўкі; κ – (капа) каэфіцыент цеплаправоднасці.

$$\alpha = \frac{1}{3} \bar{\lambda} \bar{v} \rho C_{удз.},$$

Калі параметры часціцы выразіць праз параметры фанона і крышталя, то

$$\alpha = \frac{1}{3} \lambda_{\phi} v_{\phi} \rho \frac{C_{\mu}}{M},$$

Калі эксперыментальна вызначыць α і $v_{\phi} = v_{\text{гука}}$, і ведаць ρ , M , C_{μ} , то можна вызначыць λ_{ϕ} , як квазічасціцы, якая існуе ўнутры крышталя і пераносіць энергію ад адной яго часціцы да другой. Можна паказаць, што

$$\lambda_{\min} \approx 2d,$$

дзе d – пастаянная крышталічнай рашоткі;

λ_{\min} – найменшая даўжыня хвалі, якая ўзбуджаецца ў крышталі.

Цеплаправоднасць дыэлектрычных крышталёў на 2-3 парадкі большая, чым цеплаправоднасць газаў, і на столькі ж парадкаў ніжэй, чым цеплаправоднасць металаў.

$$C_{\mu} = 9R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{x_{\max}} \frac{e^x x^4}{(e^x - 1)^2} dx$$

§ 9 Электропроводность металла.

$\rho = \rho_{\text{прям.}} + \rho_{\text{ваг.}}$, где ρ – удельное сопротивление.

При $T=0$ $\rho_{\text{ваг.}}=0 \Rightarrow \rho = \rho_{\text{прям.}}$. Проводность $\sigma = 1/\rho$.

Разглядим движение электрона в валентной зоне металла, как изменится движение электрона в электрическом поле напряженности \vec{E} .

Уравнение движения электрона:

$$m^* \frac{d\vec{v}_{\text{дрэйф}}}{dt} = e\vec{E} + r\vec{v}_{\text{дрэйф}},$$

дзе $e\vec{E}$ - электр. сіла, якая дзейнічае на электрон;

$r\vec{v}_{дрэйф}$ - сіла супраціўлення;

r - каэфіцыент супраціўлення;

m^* - эфектыўная маса электрона, якая ўлічвае ўздзеянне на электрон поля крышталічнай рашоткі, з улікам якога яго можа лічыць свабодным;

$v_{дрэйф}$ - дрэйфовая хуткасць электронаў, якая вызначае хуткасць іх накіраванага руху.

Калі $E=0$, то $v_{дрэйф}$ павінна \downarrow .

$$m^* \frac{d\vec{v}_{дрэйф}}{dt} = r\vec{v}_{дрэйф}; \text{ скалярна } m^* \frac{dv_{дрэйф}}{dt} = -rv_{дрэйф}$$

Разгледзім пераменныя:

$$\int_{v_0}^v \frac{dv_{дрэйф}}{v_{дрэйф}} = -\frac{r}{m^*} \int_0^t dt ;$$

$$\ln v \Big|_{v_0}^v = -\frac{r}{m^*} t \Rightarrow v_{др} = v_0 e^{-\frac{r}{m^*} t} ;$$

$$\frac{m^*}{r} = \tau$$

- час рэлаксацыі.

$$v_{др} = v_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Калі рух электронаў устанавіўся, г.зн., што дрэйфавая хуткасць становіцца const, тады паскарэнне=0.

$$e\vec{E} + r\vec{v}_{др} = 0 ;$$

у праекцыях $-eE - rv_{др} = 0$

$$v_{др} = -\frac{e}{r} E = \left| \tau = \frac{m^*}{r} \right| = -\frac{e\tau}{m^*} E$$

$$\frac{e\tau}{m^*} = b$$

- рухомасць электронаў.

$$v_{др} = -bE \quad \text{або} \quad b = \frac{v_{др}}{E}; E = 1 \frac{V}{M},$$

дзе b – хуткасць дрэйфу, якую набываюць электроны ў электрычным полі адзінкавай напружанасці.

Шчыльнасць току

$$\vec{j} = -en\vec{v}_{др} = (-e)n \left(-\frac{e\tau}{m^*} \vec{E} \right) = \frac{e^2 n \tau}{m^*} \vec{E};$$

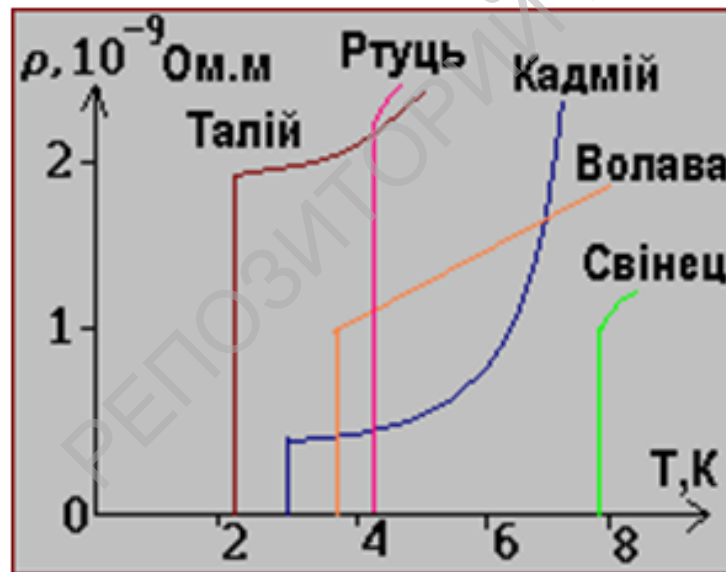
$\vec{j} = \sigma \vec{E}$ - закон Ома у дыф-най форме; σ – электраправоднасць.

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m^*}$$

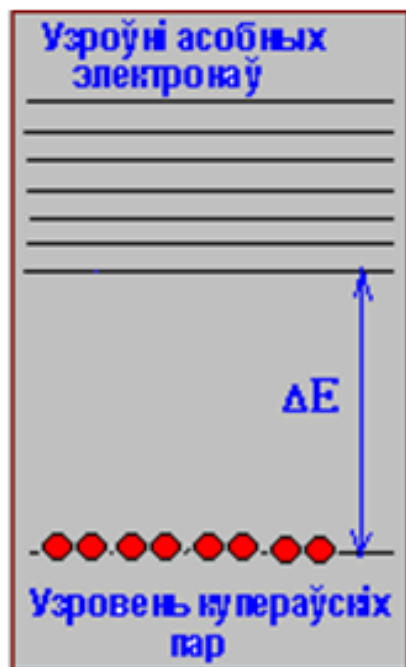
- вызначае электраправоднасць металаў

§ 10 Квантавыя з'явы пры нізкіх тэмпературах.

У 1911 годзе Камерлінг-Онэс доследна паказаў, што пры $T=4,2$ К супраціўленне ртуті рэзка падае да нуля.



Гэтая тэорыя была распрацавана Бардзіным-Куперам-Шрыфферам (БКШ), а пара электронаў атрымала назву купераўскай пары.



Узроўні асобных электронаў. ΔE – энергетычная шчыліна.

$$\Delta E = 2\hbar\omega_{\max} e^{-\frac{1}{n(E_F)V_{\text{э-ф}}}}$$

дзе ω_{\max} – максімальная дэбаеўская частата фатонаў;

$n(E_F)$ – шчыльнасць энергетычных узроўняў электронаў паблізу мяжы Фермі;

$V_{\text{э-ф}}$ – інтэнсіўнасць узаемадзеяння электронаў праз фатоны.

Бачым, што $\Delta E \sim \omega_{\max}, n(E_F), V_{\text{э-ф}}$.